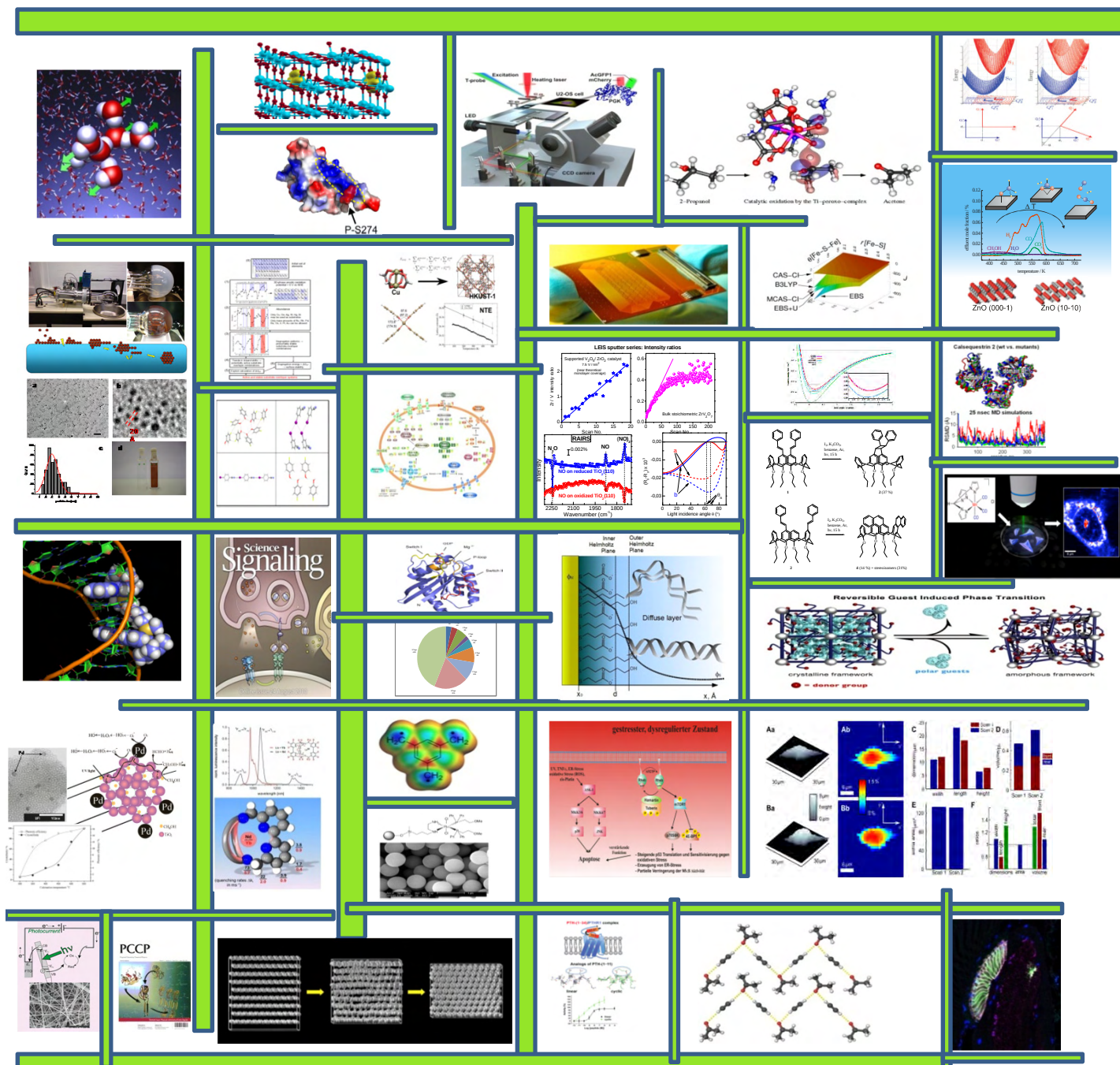
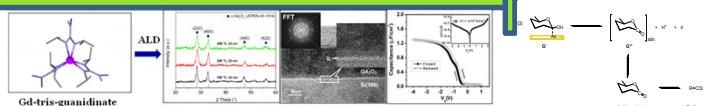


Forschung 2010



Ruhr-Universität Bochum



Auch dieser Jahresbericht soll 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 (<http://www.chemie.rub.de/>) vertiefte Einblicke erhalten.

Again this yearly report of the faculty of chemistry and biochemistry of the Ruhr-Universität Bochum is supposed to provide a flavor about the diversity of the research topics. If you need additional information to individual research topics, you are welcome to contact the research groups directly following the links, email addresses or telephone numbers provided with the research highlights. Moreover, you may find additional information on the website of the faculty (<http://www.chemie.rub.de/>).

Es hat sich wie immer sehr viel getan in der Fakultät, so dass ich sie nur mit einigen Links zu der entsprechenden Information leiten möchte:

As a matter of fact, many important things happened during the last year. I just want to guide you to some of the related information through the list of the following links:

- <http://www.ruhr-uni-bochum.de/solvation/index.html>
- <http://www.rd.ruhr-uni-bochum.de/ifsc/>
- <http://www.sfb558.de/>
- <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ces/>
- <http://www.ruhr-uni-bochum.de/acc/terahertz/>
- <http://aktuell.ruhr-uni-bochum.de/pm2011/pm00219.html.de>

Bochum, August 2011



(Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann)

Beispiele aus der Forschung

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 1

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

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2

Prof. Dr. Roland Fischer (Organometallics & Materials)	8
Prof. Dr. Anjana Devi (Chemie anorganischer Materialien)	9
Dr. Rochus Schmid	10
JP Dr. Radim Beranek	11

Lehrstuhl für Organische Chemie 1

Prof. Dr. John MacCaskill	12
Prof. Dr. Chiara Cabrele	13

Lehrstuhl für Organische Chemie 2

Prof. Dr. Wolfram Sander	14
Prof. Dr. Gerald Dyker (Metallorganische Synthesechemie)	15

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1

Prof. Dr. Christian Herrmann (Protein-Interaktionen)	16
--	----

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 2

Prof. Dr. Martina Havenith-Newen	17
JP Dr. Simon Ebbinghaus	18
Dr. Christian Müller	19
Prof. Dr. Hermann Weingärtner	20

Lehrstuhl für Analytische Chemie

Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann	21
Prof. Dr. William Sheldrick	22
Dr. Dirk Wolters	23
Dr. Nicolas Plumere	24
Dr. Fabio La Mantia	25
Dr. Aliaksandr Bandarenka	26

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Dominik Marx	27
Dr. Jörg Behler	28
Prof. Dr. Christof Hättig	29
Prof. Dr. Werner Kutzelnigg	30
Prof. Dr. Volker Staemmler	31

Lehrstuhl für Technische Chemie

Prof. Dr. Martin Muhler	32
Prof. Dr. Wolfgang Grünert (Struktur/Reaktivität heterogener Katalysatoren)	33
Prof. Dr. Michael Wark	34
Dr. Yuemin Wang	35

Lehrstuhl für Biochemie 1

Prof. Dr. Michael Hollmann (Rezeptorbiochemie)	36
Prof. Dr. Guiscard Seeböhm	37

Lehrstuhl für Biochemie 2

Prof. Dr. Rolf Heumann (Molekulare Neurobiochemie)	38
Prof. Dr. Irmgard Dietzel-Meyer (Elektrochemie neuraler Zellen)	39
Prof. Dr. Raphael Stoll	40
Prof. Dr. Bernd Hovemann	41

Didaktik der Chemie

Prof. Dr. Katrin Sommer	42
-------------------------------	----

Forscherguppe 618	43
-------------------------	----

Forscherguppe 630	44
-------------------------	----

Zentrum für Elektrochemie (CES)	45
---------------------------------------	----

Veröffentlichungen

Anorganische Chemie 1.....	46
Anorganische Chemie 2.....	48
Organische Chemie 1.....	51
Organische Chemie 2.....	51
Physikalische Chemie 1.....	52
Physikalische Chemie 2.....	53
Analytische Chemie.....	54
Theoretische Chemie	58
Technische Chemie	60
Biochemie 1	63
Biochemie 2	64
Didaktik der Chemie.....	65
Promotionen 2010	66

Nils Metzler-Nolte

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie;

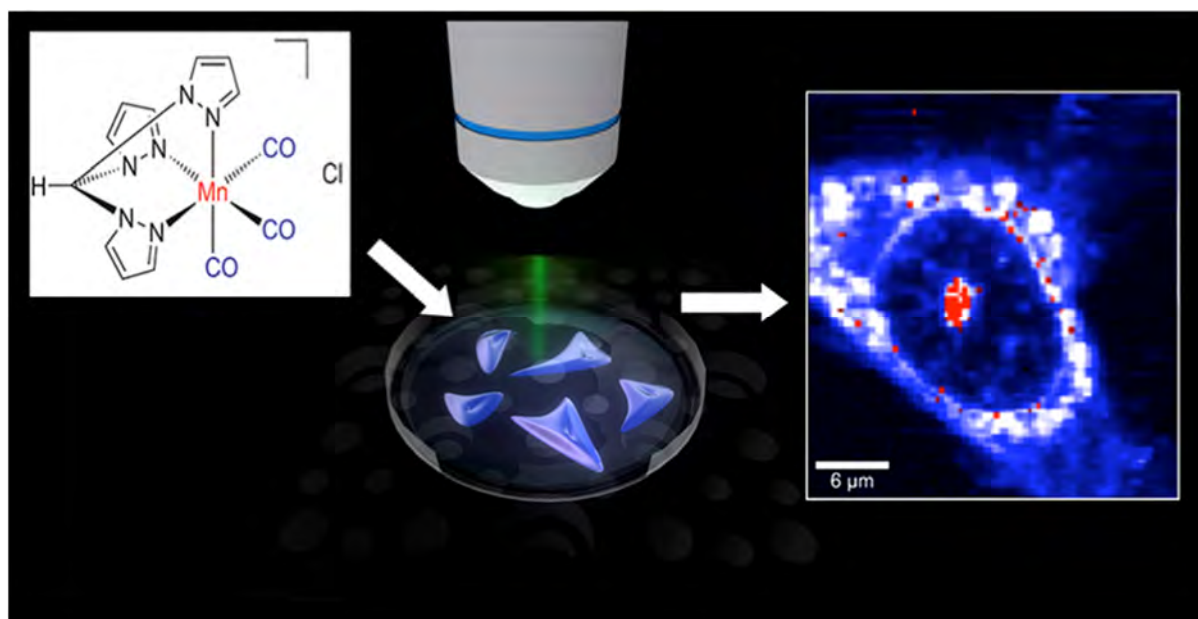
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

K. Meister, J. Niesel, U. Schatzschneider, N. Metzler-Nolte, D. A. Schmidt, M. Havenith, *Angew. Chem. Int. Ed.* **49** (2010) 3310 – 3312. Label-Free Imaging of Metal–Carbonyl Complexes in Live Cells by Raman Microspectroscopy.

In dieser Arbeit zeigen wir, wie die Raman-Mikroskopie als eine neue, Marker-freie Imaging-methode benutzt werden kann, um die Verteilung eines Metallkomplexes in lebenden Zellen zu ermitteln. Micro-Raman-Aufnahmen wurden von HT29 Zellen gemacht, die mit einem $\text{Mn}(\text{CO})_3$ -Komplex inkubiert worden waren. Die Aufnahmen zeigen, daß der Komplex die Zellmembran durchdrungen hat und innerhalb der Zellen im wesentlichen in der Kernmembran sowie dem Nucleolus lokalisiert ist. Die Carbonylschwingung dieses *CO-releasing molecule* (CORM) dient als intrinsisches Label, welches direkt zur Detektion und Lokalisierung dieses Organometallkomplexes benutzt werden kann. In dieser Arbeit, die von mehreren Gruppen des *Research Departments Interfacial Systems Chemistry* gemeinsam durchgeführt wurde, erhielten wir so Informationen über die Aufnahme und die intrazelluläre Lokalisierung dieses organometallischen Wirkstoffkandidaten.



This work uses Raman microscopy to trace the distribution of an organometallic complex as a new marker-free imaging modality with tailor-made properties inside living cells. Micro-Raman images of a HT29 cell incubated with a $\text{Mn}(\text{CO})_3$ complex show that the compound has penetrated the cellular membrane and is localised mainly in the nuclear membrane and the nucleolus. The $\text{C}\equiv\text{O}$ vibration of this CO-releasing molecule (CORM) serve as intrinsic labels, thereby making a label-free identification and localization of this metal complex inside living cells possible and providing insights into drug uptake mechanisms and intracellular targeting of organometallic drug candidates. This work was carried out jointly by several groups of the *Research Department Interfacial Systems Chemistry*.

Klaus Merz

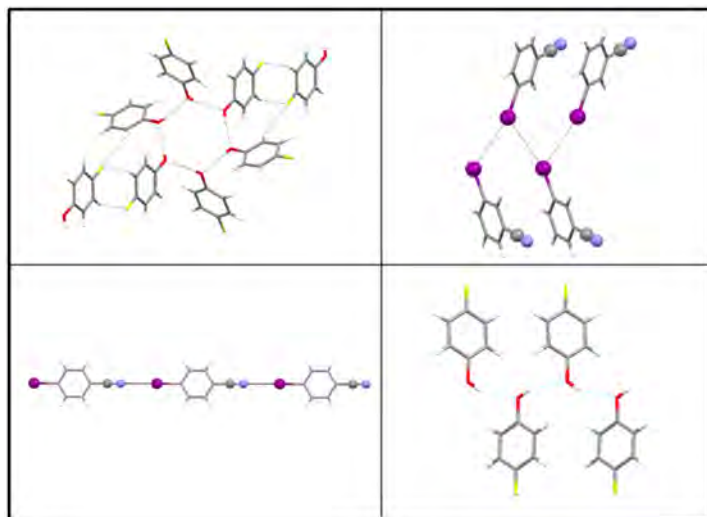
Anorganische Chemie I;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: klaus.merz@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ac1/merz/>

K. Merz, V. Vaslyeva, Highlight *CrystEngCom* 12 (2010) 3989-4002: Development and Boundaries in the Field of Supramolecular Synthons



The theme of supramolecular synthons runs through all disciplines of crystal engineering. The concept of supramolecular synthons has received ever increasing attention in various fields since it was defined and introduced in 1997. This trend is manifest in the exploding number of articles published, and not only in the specialised journals, *Crystal Growth and Design* and *CrystEngComm*. Attention is being given both to supramolecular synthons, which involve strong intermolecular interactions, and to weak intermolecular interactions, for instance C-X $\cdots$ CN, C-H $\cdots$ N, C-H $\cdots$ F or X $\cdots$ X, in the interpretation and understanding of molecular aggregation in the solid state. This highlight article will give a picture of the rapid development of interest in supramolecular synthons in the last ten years together with a discussion about the boundaries of this concept.

tions, and to weak intermolecular interactions, for instance C-X $\cdots$ CN, C-H $\cdots$ N, C-H $\cdots$ F or X $\cdots$ X, in the interpretation and understanding of molecular aggregation in the solid state. This highlight article will give a picture of the rapid development of interest in supramolecular synthons in the last ten years together with a discussion about the boundaries of this concept.

Supramolekulare Synthone ist ein Thema, das sich allen Crystal Engineering Bereichen wiederfindet. Seit der Einführung von supramolekularen Synthone im Jahre 1997 hat eine stetig steigende Anwendung dieses Konzepts in den unterschiedlichsten Disziplinen stattgefunden. Dieser Trend manifestiert sich in der explodierenden Anzahl von publizierten Arbeiten, nicht nur in den Journalen *Crystal Growth & Design* und *CrystEngComm*. Dabei richtet sich die Aufmerksamkeit der Beiträge sowohl auf supramolekulare Synthone, die in starken intermolekularen Wechselwirkungen beteiligt sind, als auch in einem immer stärkeren Maße auf schwache intermolekulare Wechselwirkungen, wie z.B. CX $\cdots$ CN, CH $\cdots$ N, CH $\cdots$ F oder X $\cdots$ X. Die Interpretation dieser strukturdirigierenden Synthone erlaubt ein tieferes Verständnis der molekularen Aggregation im festen Zustand. Dieser Highlight Artikel gibt eine Übersicht der rasanten Entwicklung dieser Thematik in den letzten zehn Jahren und regt darüber hinaus eine Diskussion über die Grenzen dieses Konzepts an.

Anja-Verena Mudring

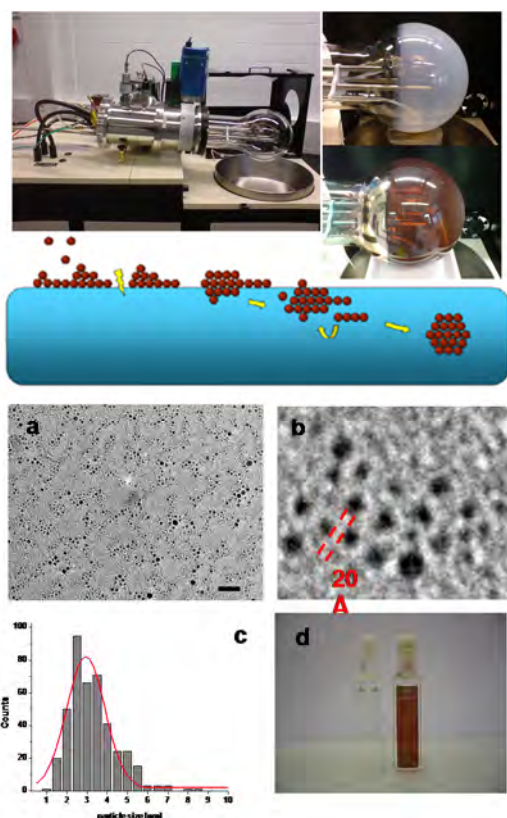
Anorganische Chemie - Festkörperchemie & Materialien;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3227408; FAX: ++49-(0)234-3214941

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

K. Richter, A. Birkner, A.-V. Mudring. *Angew. Chem. Int. Ed.* **49** (2010), 2431–2435.
Stabilizer-free, long-time stable copper nanoparticles and copper-zinc oxide nanocomposites via physical vapour deposition into ionic liquids



Ionische Flüssigkeiten (ILs) haben beachtliche Aufmerksamkeit in den letzten Jahren erhalten. Die ihnen zueignen Eigenschaften wie oftmals ein vernachlässigbarer Dampfdruck, ein breiter Flüssigkeitsbereich, gute thermische Stabilität, merkliche elektrische Leitfähigkeit und ein weites elektrochemisches Fenster sind für eine große Anzahl von Anwendungen vorteilhaft. Sie können für eine bestimmte Anwendung durch die Wahl des Kations und Anions bzw. durch die Ionenkombination maßgeschneidert werden. Die physikalische Gasphasenabscheidung von Metallen in geeignete Ionischer Flüssigkeiten unter Hochvakuum stellt einen einfachen und schnellen Weg dar, um langzeitstabile Nanopartikel-Suspensionen zu erhalten. Wir konnten zeigen, dass keine weiteren Stabilisatoren als das Lösungsmittel selbst nötig sind, um die Partikel in Lösung zu halten. Der Vorteil des Einsatzes von Ionischen Flüssigkeiten in dieser Präparationmethode ist zweifach. Zum ersten Mal kann ein Einfrieren oder starkes Kühlen des Lösungsmittels während der Synthese vermieden werden, da das verwendete Lösungsmittel selbst, über einen vernachlässigbar geringen Dampfdruck verfügt. Dies mag vollkommen neue Möglichkeiten für die Anorganische Synthesechemie eröffnen.

deute Lösungsmittel selbst, über einen vernachlässigbar geringen Dampfdruck verfügt. Dies mag vollkommen neue Möglichkeiten für die Anorganische Synthesechemie eröffnen.

Ionic liquids (ILs) have received substantial attention in recent years. Their inherent properties such as in most cases negligible vapor pressures, wide liquidus ranges, good thermal stabilities, considerable electric conductivities, wide electrochemical windows have been shown to be advantageous for a large number of applications. As salts, ionic liquids are composed of distinct cations and anions which make them widely tunable. They may be designed for specific applications through the choice of the respective cation and anion and the ion combination. Physical vapor deposition of substrates into suitable ionic liquids under high vacuum represents a simple and facile way to long-term stable nanoparticle suspensions. We were able to show that no other stabilizers as the solvent itself are needed to keep the particles in solution. The advantage of the ionic liquid is two-fold. For the first time freezing or cooling of the solvent during the synthesis can be omitted as the solvent has negligible vapor pressure. This may open completely new ways for inorganic synthesis.

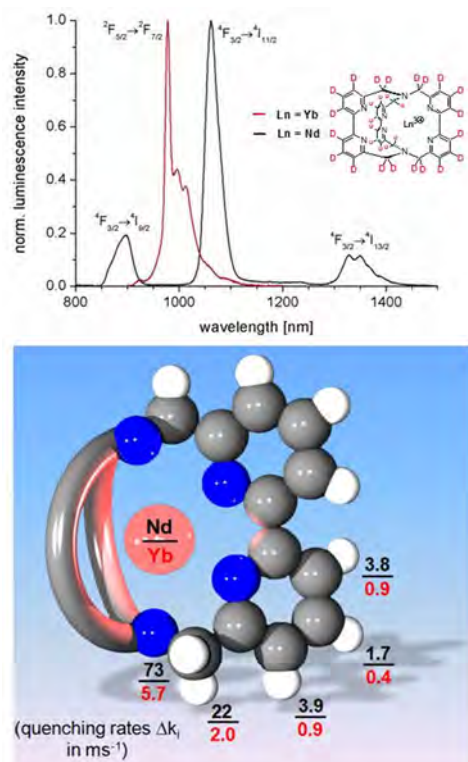
Michael Seitz

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

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

email: michael.seitz@rub.de; <http://www.lanthanoid.org>

C. Bischof, J. Wahsner, J. Scholten, S. Trosien, M. Seitz, *J. Am. Chem. Soc.* **132** (2010) 14334-14335. Quantification of C-H Quenching in Near-IR Luminescent Ytterbium and Neodymium Cryptates



Lanthanoide, die im nahen-IR-Bereich lumineszieren, haben einzigartige elektronische Strukturen, die die Entwicklung faszinierender optischer Anwendungen ermöglicht haben. Die grundlegende Herausforderung für molekulare Lanthanoid-Komplexe ist die Vermeidung von hochenergetischen X-H-Oszillatoren in der Nähe des Metallzentrums ($X = \text{O}, \text{N}, \text{C}$), die angeregte Lanthanoiden-Zustände sehr effizient deaktivieren. Während es relativ einfach ist, die Deaktivierung durch O-H- und N-H-Vibrationen zu verhindern, ist die Eliminierung von C-H-Oszillatoren inhärent schwierig, weil dieses Strukturmotiv in allen organischen Liganden häufig vorkommt. Die Substitution von C-H durch C-D verringert dieses Problem aufgrund der niedrigeren Energie der C-D-Streckschwingung im Vergleich zu C-H. Dieser Ansatz ist jedoch oft synthetisch herausfordernd und kostspielig, was zu einem Mangel an geeigneten Modellsystemen für die Untersuchung des C-H-Quenchings führt. Folglich sind diese Phänomene und ihre Besonderheiten immer noch wenig verstanden, trotz mehrfacher

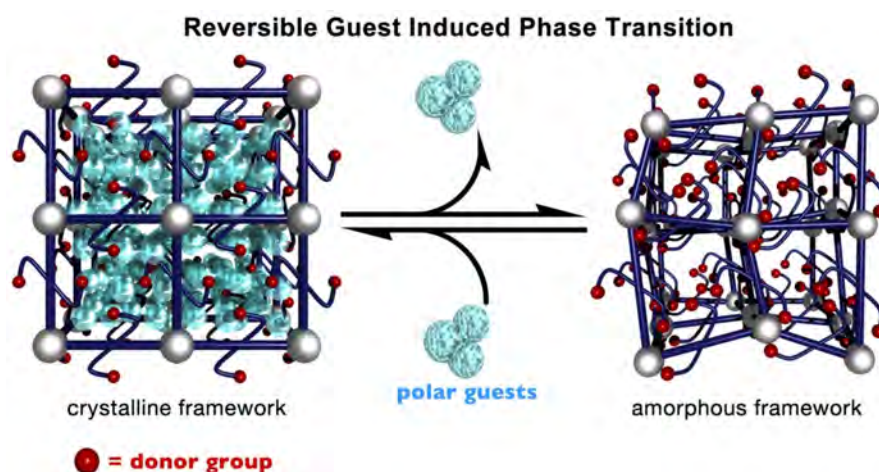
Bemühungen, diese Effekte zu quantifizieren. Wir haben in diesem Zusammenhang eine kostengünstige und hocheffiziente Methodik entwickelt, um Deuterium selektiv in Yb- und Nd-Komplexe mit Bipyridin-Cryptanden einzuführen. Diese isotonenmarkierten Cryptate erlaubten es erstmals, mittels Messungen der Lumineszenz-Abklingzeiten die Quenching-Beiträge einzelner C-H-Oszillatoren zu bestimmen.

Near-IR luminescent lanthanoids have unique electronic structures which have enabled the development of fascinating optical applications. The fundamental challenge for molecular lanthanoid complexes is the exclusion of high-energy X-H oscillators close to the metal center ($X = \text{O}, \text{N}, \text{C}$, etc.), which efficiently quench lanthanoid excited states. While nonradiative deactivation by O-H and N-H vibrational modes can easily be avoided, the elimination of C-H oscillators is inherently more difficult due to the abundance of this structural motif in organic ligands. The substitution of C-H with C-D moieties alleviates this problem due to the fact that the energy of the C-D stretching vibration is much lower compared to C-H. This approach, however, is synthetically often challenging and expensive, resulting in a lack of suitable model systems for the methodical investigation of C-H quenching. As a consequence, this phenomenon and its peculiarities are still ill-understood despite several efforts to quantify these effects. In this context, we have developed a low-cost and highly efficient methodology for the selective introduction of deuterium into Yb and Nd complexes with bipyridine cryptands. Through luminescence lifetime measurements, these isotopically labeled cryptates allowed for the first time the determination of the quenching rate contributions of individual C-H oscillators.

Roland A. Fischer

Anorganische Chemie II – Organometallics & Materials; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum; Tel.: ++49-(0)234-3224174; FAX: ++49-(0)234-3214174
email: roland.fischer@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ac2>

S. Henke, R. Schmid, J.-D. Grunwaldt, R. A. Fischer, *Chem. Eur. J.* **16** (2010) 14296-14306.
Flexibility And Sorption Selectivity In Rigid Metal-Organic Frameworks: The Impact Of Ether-Functionalised Linkers



Flexible Metal-Organische Netzwerke (Metal-Organic Frameworks, MOFs) stellen die nächste Generation von porösen Materialien dar. Durch ihre responsiven Eigenschaften eignen sich flexible MOFs besonders für Anwendungen in der Separation von Gasen und in der Sensorik. Allerdings ist die ge-

zielte Synthese von neuen flexiblen MOFs komplex und es sind bisher nur wenige responsive Gerüstpolymere bekannt. Durch Modifikation literaturbekannter, rigider Netzwerke mit zusätzlichen, kovalent gebundenen Donorgruppen, gelang es Flexibilität in diesen MOFs zu integrieren. Donorfunktionalisierte Derivate des bekannten MOF-5, $[\text{Zn}_4\text{O}(\text{bdc})_3]_n$ ($\text{bdc} = 1,4\text{-benzenedicarboxylate}$), zeigen neuartige, vollständig reversible kristallin-zu-amorph Phasenübergänge in Abhängigkeit der eingelagerten Gast-Moleküle in den Poren. Analog funktionalisierte Derivate des schichtbasierten MOF Systems $[\text{Zn}_2(\text{bdc})_2(\text{dabco})]_n$ zeigen ähnliche Flexibilität in Form von kristallin-zu-kristallin Übergängen. Außerdem weisen die funktionalisierten Netzwerke bemerkenswerte Sorptionsselektivität für CO_2 über N_2 und CH_4 aus. Diese Eigenschaft macht die Netzwerke besonderes interessant für Anwendungen in der CO_2 Separation.

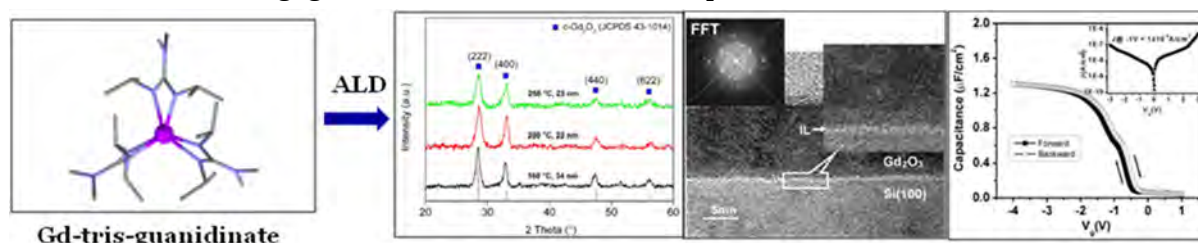
Flexible Metal-Organic Frameworks (MOFs) represent the next generation of porous materials. Due to responsive properties, flexible MOFs are particularly suitable for applications in gas separation and sensing devices. However, the targeted synthesis of novel flexible MOFs is difficult and only few responsive networks are known in the literature. Modification of well-known rigid MOFs with additional, covalently bonded donor groups can integrate distinctive framework flexibility in these formally non-responsive MOFs. Donor functionalized derivatives of MOF-5, $[\text{Zn}_4\text{O}(\text{bdc})_3]_n$ ($\text{bdc} = 1,4\text{-benzenedicarboxylate}$) show unexpected, fully reversible crystalline-to-amorphous phase transitions as a function of the incorporated guest molecules in the pores. Analog functionalized derivatives of the layer-based system $[\text{Zn}_2(\text{bdc})_2(\text{dabco})]_n$ show similar flexibility in reversible crystalline-to-crystalline transitions. In addition, the functionalized networks show remarkable sorption selectivity for CO_2 over N_2 and CH_4 , which makes the MOFs of particular interest for applications in CO_2 separation.

Anjana Devi

Inorganic Materials Chemistry - Anorganische Chemie II; 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/devi>

A. P. Milanov, K. Xu, A. Laha, E. Bugiel, R. Ranjith, D. Schwendt, H. J. Osten, H. Parala, R. A. Fischer, A. Devi, *J. Am. Chem. Soc.* **132** (2010) 36-37. Growth of Crystalline Gd_2O_3 Thin Films with a High-Quality Interface on Si(100) by Low-Temperature H_2O -Assisted Atomic Layer Deposition.

Die Reduzierung von komplementären Metalloxidhalbleiter-Komponenten (CMOS) erfordert den Ersatz von Si-basierten Gate-Dielektrika durch Materialien mit einer viel höheren Dielektrizitätskonstante ($\epsilon_r > 10$). Nur wenige von den zahlreich untersuchten Metalloxiden erfüllen die Kriterien, die für die CMOS-Prozesse geeignet sind. Seltenerd-Oxide haben ein großes Potenzial in dieser Hinsicht gezeigt, und weisen z. B. höhere Dielektrizitätskonstanten, große Bandlücken, und am wichtigsten, große Band-Offsets im Vergleich sowohl zum Valenz- als auch zum Leitungsband des Siliziums auf. Für Anwendungen in der Mikroelektronik ist Atomic Layer Deposition (ALD) die Methode der Wahl für die Abscheidung von Dünnschichten. ALD Abscheidung von Gd_2O_3 -Dünnschichten von höchster Qualität mit sehr geringem Leckstrom wurden oberflächensteuernd, selbstlimitierend mit Wachstumsraten von 1,1 Å/Zyklus abgeschieden. Auf der Grundlage der elektrischen Charakterisierung scheint es, dass die Gd_2O_3 Dünnschichten in Zukunft SiO_2 ersetzen könnten. Die Leckstromdichtewerte erfüllen bereits die höchsten Erwartungen für niedrige Standby Power-Anwendungen in 2015, welche in der neuesten Ausgabe der ITRS-Roadmap erscheint. Der Schlüssel zu diesem Erfolg war der Einsatz eines maßgeschneiderten Tris (Guanidinato) Gadoliniumprecursors, der mehrere vorteilhafte Eigenschaften, wie hohe und selektive Reaktivität gegenüber Wasser bei tiefen Temperaturen.



Downscaling of complementary metal oxide semiconductor (CMOS) devices requires the replacement of Si-based gate dielectrics with a material exhibiting a much higher dielectric constant ($\epsilon_r > 10$). Many metal oxides have been investigated, but only a very few meet all the criteria that are indispensable for the CMOS process line. Rare-earth oxides have shown great potential in this respect, exhibiting higher dielectric constants, large band gaps, and most importantly, large band offsets with respect to both the valence and conduction bands of Si. For applications in microelectronics, atomic layer deposition (ALD) is the method of choice. Gd_2O_3 thin films of superior structural quality with very low leakage current were deposited at growth rates of 1.1 Å/cycle in a surface-controlled, self-limiting ALD process. On the basis of the electrical characterization of the Pt/ Gd_2O_3 /Si(100) structures, it appears that the Gd_2O_3 films could be potential candidates for the replacement of SiO_2 -based gate dielectrics in future CMOS devices. The leakage current density values surpass the strongest requirements for low standby power applications predicted for 2015 in the latest edition of the ITRS roadmap. The key to this success was the use of a tailored all-nitrogen-coordinated tris(guanidinato)gadolinium precursor that combines several advantageous properties, including high and selective reactivity toward water at low temperature.

Rochus Schmid

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2; AG Computational Materials Chemistry;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

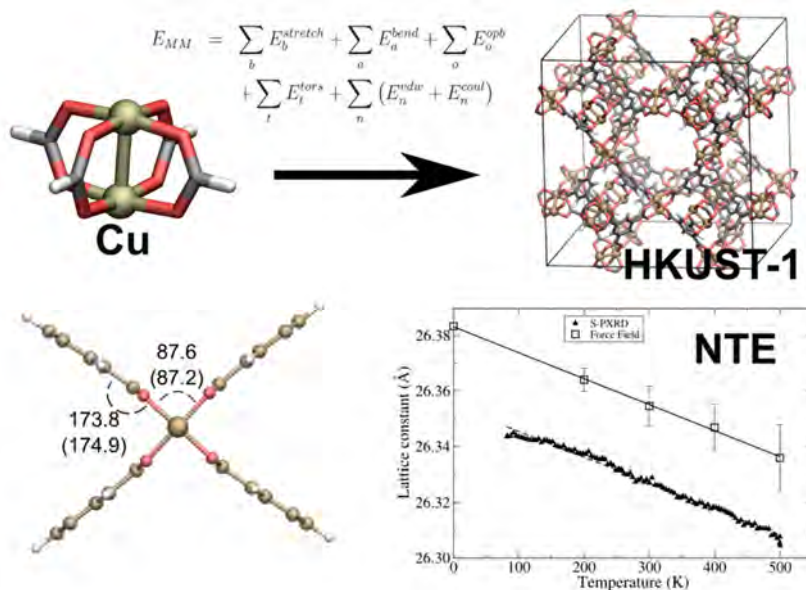
Tel.: ++49-(0)234-3224166; FAX: ++49-(0)234-3214174

email: Rochus.Schmid@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.rochusschmid.de>

M. Tafipolsky, S. Amirjalayer, R. Schmid, *J. Phys. Chem. C* **114** (2010) 14402-14409.

First-Principles-Derived Force Field for Copper Paddle-Wheel-Based Metal-Organic Frameworks

Das poröse Koordinationspolymer HKUST-1 basiert auf einem carboxylatverbrückten Kupferdimer als verknüpfender sekundärer Baueinheit (SBU). Aufgrund seiner, im aktivierten Zustand zugänglichen Metallkoordinationsstellen, stellt es eines der meist untersuchten Systeme dieser neuen Materialklasse dar. Simulationen von Wirt-Gast-Wechselwirkungen erfolgten bisher ausgehend von experimentellen Strukturen für die Matrix, wobei diese starr gehalten wurden, da keine verlässlichen Kraftfeldparameter für die anorganischen Bauteile verfügbar waren. Wir haben nun eine von uns entwickelte Methode zur systematischen Parametrisierung verwendet um, auf der Basis quantenmechanisch berechneter Referenzdaten für nicht-periodische Modellsysteme, erstmals ein genaues Kraftfeld für HKUST-1 zu entwickeln. Damit lassen sich sowohl die leichten Deformationen im periodischen Netzwerk als auch der experimentell gemessene negative thermische Expansionskoeffizient (NTE) quantitativ vorhersagen. Darüber hinaus können die Parameter auch für andere MOFs mit der gleichen SBU zur Strukturvorhersage genutzt werden.



The porous coordination polymer HKUST-1 is based on a carboxylate bridged copper dimer as a connecting secondary building unit (SBU), and represents, because of the accessible metal coordination sites in the activated state, one of the most investigated systems of this new class of materials. Since no reliable force field parameters for the inorganic part were available, experimental geometries have been used in theoretical simulations of host-guest interactions up to now, and the lattice was taken as rigid. We have used a method for the systematic parameterization, developed previously by us, to derive the first accurate force field for HKUST-1 based on quantum mechanic reference data of non-periodic model systems. It quantitatively predicts the small deformations in the periodic structure as well as the experimentally observed negative thermal expansion (NTE). Importantly, these parameters can be used also for structural predictions of other MOFs with the same SBU.

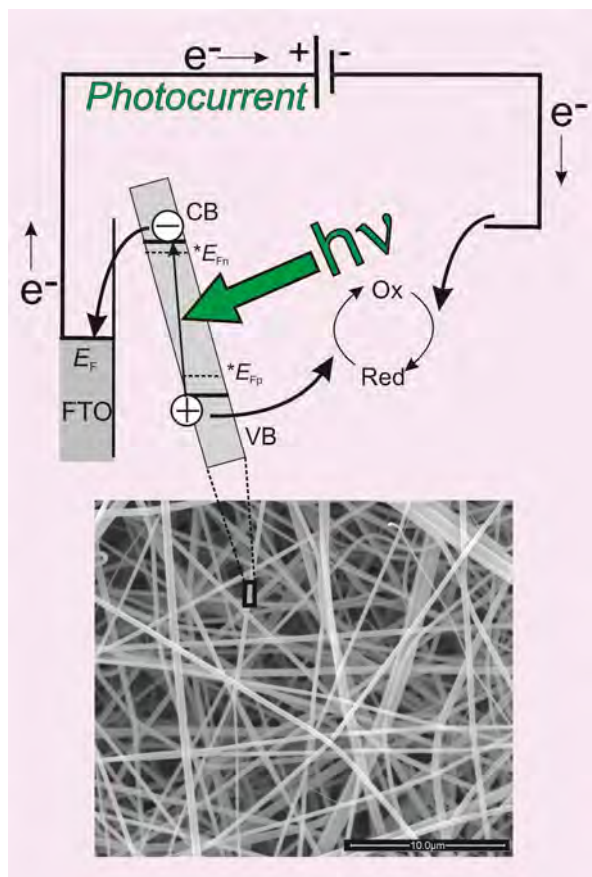
Radim Beránek

Anorg. Chem. II - Photoactive Materials; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3229431; FAX: ++49-(0)234-3214174

email: radim.beranek@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/photochem>

J. M. Macak, J. Pytel, J. Rodriguez Ruiz, R. Beranek. in "Advanced Nanostructured Solar Cells", *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **1211E** (2010) 1211-R08-34. Photoelectrochemical properties of electrospun titania nanofibers - comparison with nanoparticles



Die Entwicklung von künstlichen photochemischen Systemen, die in der Lage sind, natürliche Photosynthese nachzuahmen, hat großes Interesse geweckt, weil solche Systeme saubere und nachhaltige Energiegewinnung garantieren. Unter anderem geht es um die Entwicklung von neuartigen photochemischen Systemen, die die Sonnenenergie nutzen, um Elektrizität zu erzeugen (Solarzellen) oder nützliche chemische Reaktionen zu ermöglichen (wie z.B. Brennstoffproduktion oder Abbau von Schadstoffen). Dabei ist es oft sehr wichtig, die Struktur und Eigenschaften der photoaktiven Bauelemente auf der Nanoskala zu verstehen, um die Photoaktivität zu erhöhen. In dieser Veröffentlichung wurden mittels wellenlängenabhängiger Photostromspektroskopie die photoelektrochemischen Eigenschaften von Elektroden untersucht, die aus Titandioxidnanofasern bestehen. Der markanteste Unterschied zwischen den Nanofaserelektroden und klassischen Nanopartikelelektroden wurde im Einfluss der Kalzinierung auf die Effizienz

der Photooxidationen verschiedener Spezies (Iodid, Wasser) gefunden. Im Gegensatz zu Nanopartikelelektroden war auf den Nanofaserelektroden der Kalzinierungsschritt nicht notwendig, um die Effizienz der Photooxidation von Wasser zu erhöhen.

The development of artificial photochemical systems capable of mimicking natural photosynthesis has attracted significant interest motivated by the need to secure the future supply of clean and sustainable energy. Among other strategies, research has focused on novel types of photochemical systems capable of harnessing solar energy to produce electricity (solar cells) or drive useful chemical transformations (for example, fuel production or degradation of harmful pollutants). Importantly, the control of the structure and properties on nanoscale is often essential for enhancing the photoactivity of such architectures. In this paper photoelectrochemical properties of photoelectrodes consisting of pressed layers of electrospun TiO_2 nanofibers were investigated by wavelength-resolved photocurrent measurements. The most striking difference between nanofiber and particulate electrodes was found in the effect of calcination on the efficiency of photooxidation of different species (water, iodide). In contrast to particulate electrodes the calcination step was not necessary to enhance the efficiency of water photooxidation on nanofiber electrodes.

John McCaskill

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

ECCell is an EU sponsored project in FP7, funded in the ICT Future Emerging Technologies by the FET-Open program. (2008-2011). The aim of the project is to establish a novel basis for future embedded information technology by constructing the first *electronically programmable chemical cell*. This will lay the foundation for immersed micro- and nanoscale molecular information processing with a paradigm shift to digitally programmable chemical systems. The project involves partners from information technology, chemistry, materials science, microfluidics and physics from across Europe with core groups from Germany, Holland, Denmark, Israel and Italy: (J.S. McCaskill, RUB-BioMIP, G.von Kiedrowski, RUB-BioORG, A. Herrmann, Groningen, S. Rasmussen, Southern Denmark, I. Willner, Jerusalem, K. Lindgren, ECLT). For details consult the ECCell project web site at <http://www.istpace.org/ECCell>.

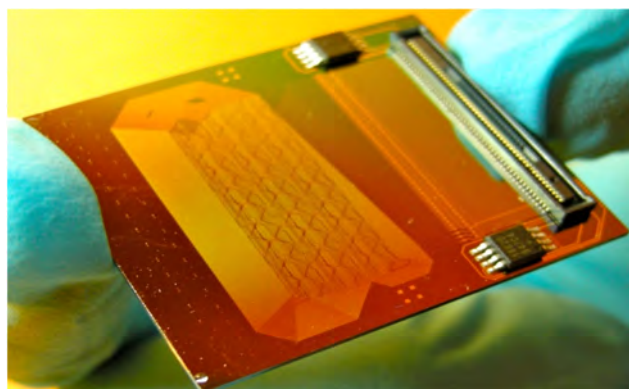


Fig.1 Physical realization of programmable environment for electronic chemical cells. Microfluidic channels at the rear supply a continuous flow of chemicals and the system is connected via CCD cameras and FPGA chip to a monitoring computer.

Chemical cells must combine self-replication, self-containment and self-regulation of resources (metabolism) enabling evolution to qualify as alive. Electronic chemical cells will do this in conjunction with a reconfigurable electronic system. ECCell is employing novel families of fully synthetic hybrid informational polyelectrolyte copolymers (not simply DNA), which simultaneously support all three cell functionalities. Their self-assembly under electric field control is the primary information processing mode of this technology. Electrochemical reactions at digitally controlled electrodes regulate pH, microfluidic flow and metabolite concentrations. The research will establish an effective IT interface between microelectronic and molecular information processing, by demonstrating its use to achieve a hard chemical synthetic systems objective (an artificial cell) opening a platform for programming a novel chemical Living Technology at the microscale.

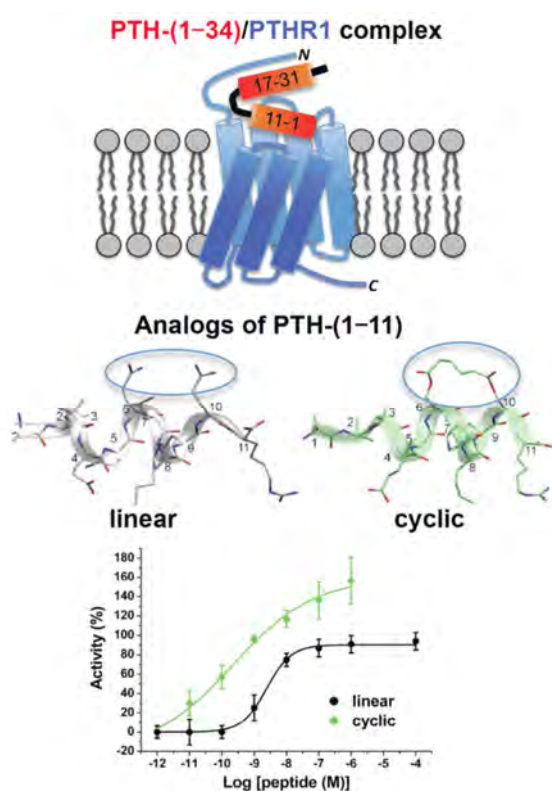
Chiara Cabrele

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

Tel.: ++49-(0)234-3227034

email: chiara.cabrele@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc1/cabrele>

A. Caporale, M. Sturlese, L. Gesiot, F. Zanta, A. Wittelsberger, C. Cabrele, *J. Med. Chem.* **53** (2010) 8072–8079. Side-chain cyclization based on serine residues: Synthesis, structure and activity of a novel cyclic analogue of the parathyroid hormone fragment 1–11



Das Parathormon PTH (84 Aminosäuren) reguliert die Konzentration von Ca^{2+} und PO_4^{3-} im Blut durch die Aktivierung seines G-Protein-gekoppelten Rezeptors (PTHr1). PTH-(1–34) wird für die Behandlung von Osteoporose in den USA angewendet, um die Knochendichte zu erhöhen. PTH-(1–11) kann den Rezeptor nur schwach aktivieren, jedoch sein Analogon *H*-Aib-Val-Aib-Glu-Ile-Gln-Leu-Nle-His-Gln-Har- NH_2 , das zwei Helix-stabilisierende Reste (Aib^{1,3}) und die nicht-proteinogenen Aminosäuren Norleucin (Nle⁸) und Homoarginin (Har¹¹) enthält, weist Aktivität im nanomolaren Bereich auf. Zur Erhöhung des helikalen Charakters und der proteolytischen Stabilität, haben wir Gln⁶ und Gln¹⁰ durch Ser⁶ und Ser¹⁰ ersetzt und die β -Hydroxygruppen mit Adipinsäure kovalent verknüpft. Die NMR Strukturen der zwei Analoga zeigen, dass die verbrückten Estergruppen mit den γ -Amid-gruppen der Glutamine perfekt überlappen. Darüber hinaus weist das Cyclopeptid 12-fach höhere Aktivität als das

lineare Analogon auf. Sowohl die konformative Einschränkung als auch die Beibehaltung der Schlüsselemente, die für die Bindung und Aktivierung des Rezeptors nötig sind, liegen dem gelungenem Peptiddesign zu Grunde und bieten weitere Einblicke in die Rezeptor-gebundenen Konformation des nativen Liganden.

The 84-residue long parathyroid hormone (PTH) regulates the concentration of Ca^{2+} and PO_4^{3-} in the blood by activating its G-protein-coupled receptor (PTHr1). PTH-(1–34) is used for the treatment of osteoporosis in the USA to increase bone mineral density. PTH-(1–11) can activate the receptor only weakly, but its analog *H*-Aib-Aib-Val-Glu-Ile-Gln-Leu-Nle-His-Gln-Har- NH_2 , which contains two helix-stabilizing residues (Aib^{1,3}) and the non-proteinogenic residues norleucine (Nle⁸) and homoarginine (Har¹¹), is active in the nanomolar range. To increase the helical character and proteolytic stability, we have replaced Gln⁶ and Gln¹⁰ by Ser⁶ and Ser¹⁰ and covalently linked the β -hydroxyl groups with adipic acid. The NMR structures of the two analogs show that the ester groups of the bridge perfectly overlap with the glutamine γ -amide groups. Moreover, the cyclic peptide is 12-fold more potent than the linear one. Both the conformational constraint and the retention of the key elements that are necessary for binding and activation of the receptor, have led to a successful peptide design and provide further insight into the receptor-bound conformation of the native ligand.

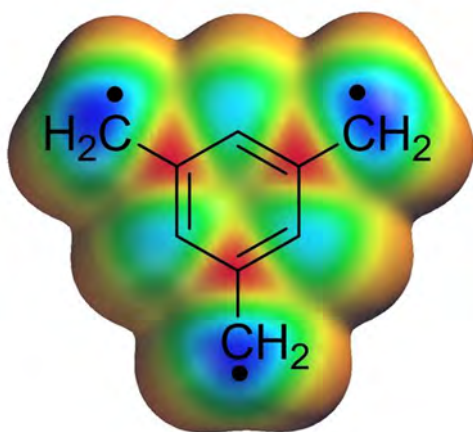
Wolfram Sander

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

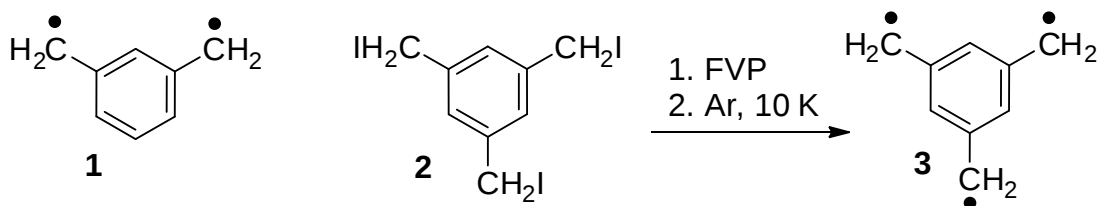
Tel: +49 234 3224593, FAX +49 234 3214353

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

P. Neuhaus, W. Sander, *Angew. Chem. Int. Ed.* **49** (2010) 7277-7280. Isolation and characterization of the triradical 1,3,5-trimethylene-benzene



Organische high-spin Moleküle können als Modellverbindungen für das Design organischer magnetischer Materialien dienen. Die am meisten verwendete Koppelungseinheit für eine ferromagnetische Kopplung zwischen π – Radikalzentren ist die *m*-Phenylene – Gruppe. Entsprechend zeigt 1,3-Dimethylenbenzol (*m*-Xylylen) **1** einen robusten Triplett Grundzustand. 1,3,5-Trimethylenbenzol **3** bildet die Basis einer ganzen Reihe organischer high-spin Polyradikale mit ferromagnetischer Kopplung, und mehrere Derivate von **3** wurden in der Literatur beschrieben. Das Stammsystem selbst konnte jedoch bisher nicht isoliert und spektroskopisch charakterisiert werden.



Nun gelang die Synthese von 1,3,5-Trimethylenbenzol durch Flash Vakuum Pyrolyse von 1,3,5-Tris(iodomethyl)benzol **2** bei 480°C und Einfangen der entstandenen Produkte in einer Argonmatrix bei 10 K, was die IR-, UV/Vis, und ESR- spektroskopische Charakterisierung von **3** in seinem Quartett Grundzustand ermöglichte.

Organic high-spin molecules can serve as model compounds for the design of organic magnetic materials. The most frequently used coupling unit to achieve ferromagnetic coupling between π radical centers in the *m*-phenylene group. Thus, 1,3-dimethylenbenzene (*m*-xylylene) **1** was shown to have a robust triplet ground state. 1,3,5-Trimethylenbenzene **3** forms the basis of a number of organic high-spin polyradicals, and several derivatives of **3** have been described in literature, trimethylenbenzene has so far eluded characterization, though. Flash vacuum pyrolysis of 1,3,5-tris(iodomethyl)benzene **2** with subsequent trapping of the products in an argon matrix at 10 K allowed us now to obtain IR, UV/Vis, and EPR spectra of the pyrolysis products and to characterize **3** in its quartet ground state.

Gerald Dyker

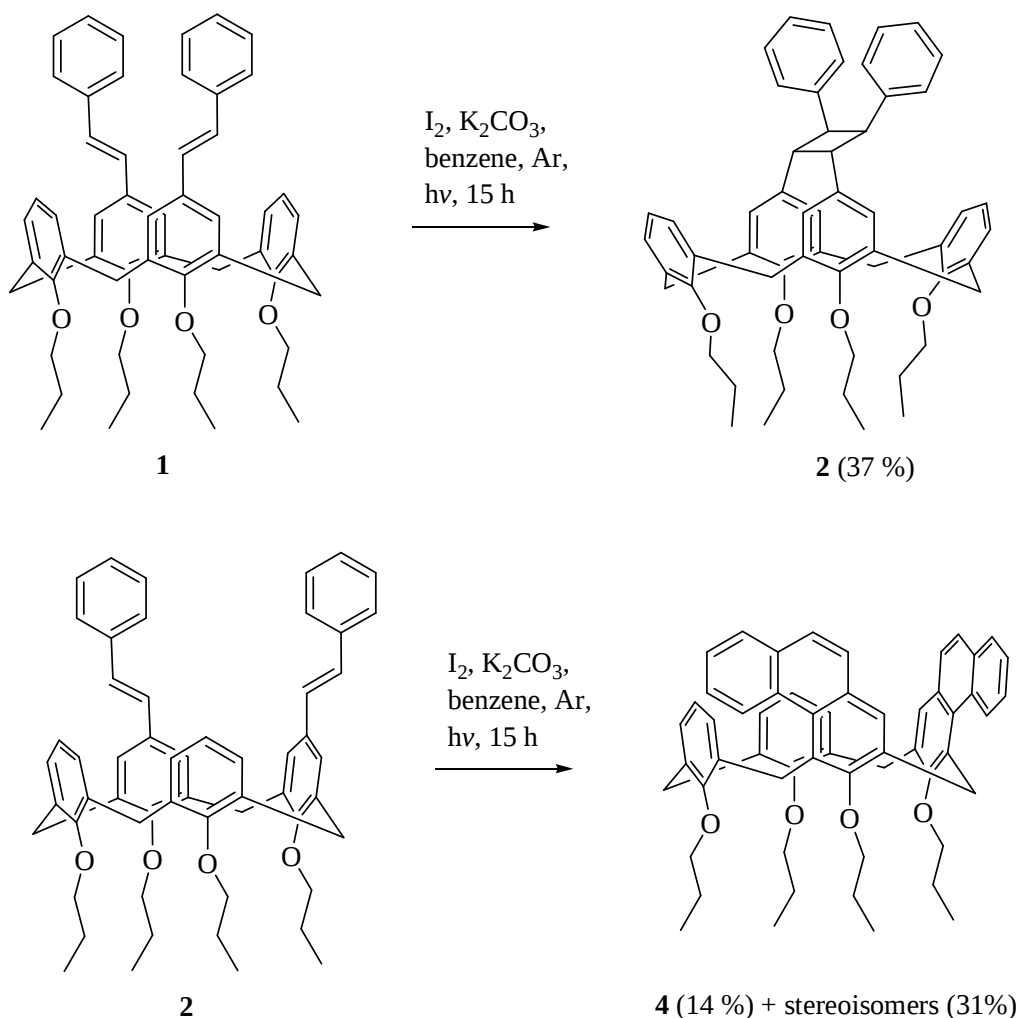
Org. Chem. - Organische Synthese und Katalyse; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

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

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

W. Hüggenberg, A. Seper, I. M. Oppel, G. Dyker, *Eur. J. Org. Chem.* **2010**, 6786-6797,
Multifold Photocyclizations at Styrylcalix[4]arenes

Eine photochemische transannulare [2+2]-Cycloaddition ist der bevorzugte Reaktionspfad des 1,3-substituierten Styrylcalix[4]arens **1**. Das 1,2-Isomer **3** reagiert hingegen zu Calyx[4]-bisphenanthrene **4** und dessen Stereoisomere, die als erweiterte, teils chirale molekulare Cavitäten von Interesse sind.



A photochemical transannular [2+2]-cycloaddition is the main reaction pathway of the 1,3-substituted styrylcalix[4]arene **1**, while 1,2-distyrylcalix[4]arene **3** leads to calyx[4]-bisphenanthrene **4** and its stereoisomers, which are of interest as extended or chiral molecular cavities.

Christian Herrmann

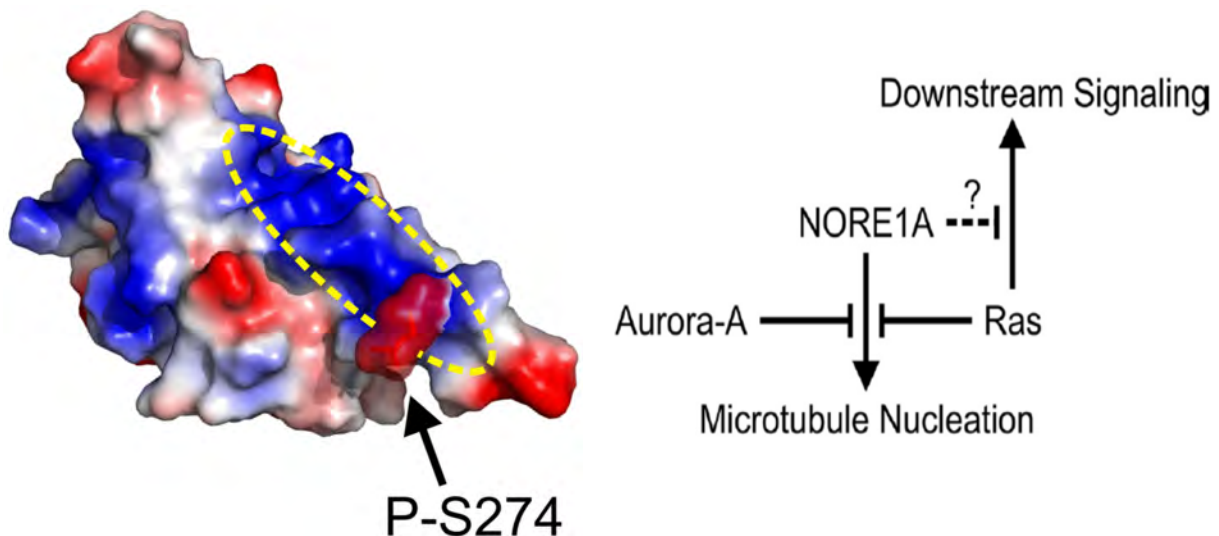
Physikalische Chemie 1; AG Protein-Interaktionen; Ruhr-Uni Bochum; D-44780 Bochum

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

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

C. Bee, A. Moshnikova, C. D. Mellor, J. E. Molloy, Y. Koryakina B. Stieglitz, A. Khokhlatchev, C. Herrmann, *J. Biol. Chem.* **285** (2010) 16258-16266. Growth and tumor suppressor NORE1A is a regulatory node between Ras signaling and microtubule nucleation.

NORE1A ist bekannt als Vertreter einer Klasse von Tumorsuppressoren, die gleichzeitig auf einem der durch Ras aktivierten Signalwege liegen. Es wird vermutet, dass ihre biologische Funktion bei der Suppression von Zell- und Tumorwachstum von ihrer Fähigkeit abhängt, an das Mikrotubuli-Zellskelett zu binden. Es gibt jedoch bisher keinen Nachweis einer direkten Interaktion geschweige denn einen Vorschlag für einen molekularen Mechanismus. Mit dieser Publikation in *J. Biol. Chem.* konnten wir zeigen, dass NORE1A direkt an Tubulin-Einheiten bindet und deren Polymerisation beeinflusst, offensichtlich vor allem die Nukleation. Dabei hat sich herausgestellt, dass dieser Prozess einerseits durch Ras-Bindung nach einem kompetitiven Mechanismus reguliert wird und andererseits auch durch die Phosphorylierung durch Aurora-A Kinase im Tubulinbindungsbereich von NORE1A (s. ellipsoider Bereich in der Abbildung). Mithilfe unserer Daten lässt sich ein Teil eines Regelnetzwerkes definieren, das die Aktivitäten von Ras, NORE1A und Aurora-A mit der Regulation der Ausbildung des Tubulingerüstes verbindet (s. Schema).



NORE1A is a Ras binding protein which belongs to a group of tumor suppressors known as Ras association domain family. Their growth and tumor suppressive function is assumed to be dependent on association with the microtubule cytoskeleton. However, a detailed understanding of this interplay is still missing. Here we show that NORE1A directly interacts with tubulin and is capable of nucleating microtubules. Strikingly, the ability to stimulate nucleation is regulated in a dual specific way, either via phosphorylation of NORE1A within the Ras binding domain by Aurora-A kinase (see dashed area in the figure) or via binding to activated Ras. We also demonstrate that NORE1A mediates a negative effect of activated Ras on microtubule nucleation. Based on our results we propose a novel regulatory network comprised by tumor suppressor NORE1A, the mitotic kinase Aurora-A, the small GTPase Ras and the microtubule cytoskeleton (see scheme).

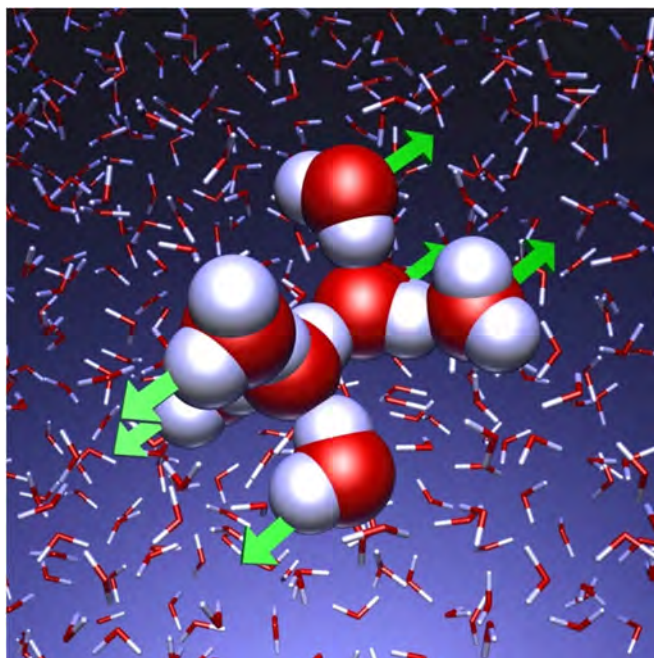
Martina Havenith-Newen

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

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

email: martina.havenith@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/pc2>

M. Heyden, J. Sun, S. Funkner, G. Mathias, H. Forbert, M. Havenith, D. Marx, *PNAS*, **107** (27) (2010) 12068-12073. Dissecting the THz spectrum of liquid water from first principles *via* correlations in time and space



Obwohl Wasser eines der einfachsten heteronuklearen Moleküle der Chemie ist, weisen die feste und flüssige Phase zahlreiche Anomalien auf, deren Ursache dem ausgebildeten Wasserstoffbrückennetzwerk zuzuordnen ist. THz-Spektroskopie ist sensitiv für charakteristische, kollektive Schwingungen des Wasserstoffbrückennetzwerkes und erweist sich somit als ideales Untersuchungsmittel für Wasser und wässrige Lösungen. Klassische Molekulardynamiksimulationen können die dabei gewonnenen Spektren nicht akkurat wiedergeben. In der vorliegenden Arbeit haben wir daher auf wesentlich aufwendigere *ab initio* Simulation zurückgegriffen. Wir konnten dabei zeigen, dass

der spektrale Fingerabdruck des Wassers bei 200 cm^{-1} im Wesentlichen über intermolekulare Translationsschwingungen der ersten Solvathülle zu verstehen ist. Des Weiteren wurde nachgewiesen, dass kollektive Schwingungen mit der zweiten Solvathülle am stärksten bei 80 cm^{-1} beitragen. Wir erwarten deshalb, dass eine Einlagerung von Molekülen in das Wasserstoffbrückennetzwerk dessen Dynamik mindestens über zwei Solvathüllen beeinflussen kann.

Although water is one of the simplest heteronuclear molecules, the solid and fluid phase exhibit many anomalies. The origin of this behavior is assigned to the hydrogen bond network. THz spectroscopy is sensitive to the characteristic collective vibrations of the hydrogen bond network and therefore an ideal tool to probe the intermolecular dynamic in water and aqueous solutions. Here, classical molecular dynamics simulations cannot reproduce the measured spectra. In the present work, we use expensive *ab initio* simulations showing that the spectral fingerprint of water at 200 cm^{-1} is basically caused by intermolecular translational motions in the first solvation shell. Furthermore, we point out that collective motions including the second solvation shell contribute most significant at 80 cm^{-1} . We expect that incorporating molecules in the hydrogen bond network will influence its dynamics at least up to the second solvation shell.

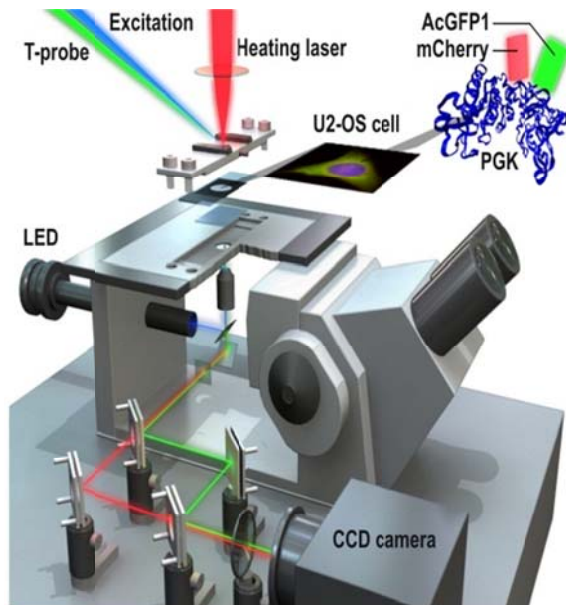
Simon Ebbinghaus

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

Tel.: ++49-(0)234-3225277; FAX: ++49-(0)234-3214183

email: Simon.Ebbinghaus@rub.de; www.rub.de/pc2/ebbinghaus

S. Ebbinghaus, A. Dhar, J.D. McDonald and M. Gruebele. *Nature Methods* 7 (2010) 319-323.
Protein folding stability and dynamics imaged in a living cell



Die Struktur und Funktion von Proteinen wird meist *in vitro* untersucht, z.B. in verdünnter Lösung oder in Kristallform. Die hierbei erhaltenen Ergebnisse ermöglichen Rückschlüsse auf die Funktion der Proteine in der lebenden Zelle. Allerdings werden die möglichen Einflüsse der dicht-gepackten, heterogenen zellulären Umgebung auf die Funktion meist nicht berücksichtigt. Durch Kombination einer schnellen Temperatursprungmethode mit Fluoreszenzmikroskopie haben wir eine neue Technik entwickelt (Fast Relaxation Imaging, FReI), mit der biomolekulare Dynamik direkt *in vivo* gemessen werden kann. Wir haben mit dieser Methode die Stabilität und Faltungskinetik des Enzymes Phosphoglyceratkinase (PGK)

in einer einzelnen Knochenmarkszelle mit hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung gemessen. Vergleichende Studien *in vitro* haben es uns ermöglicht, den Einfluss der zellulären Umgebung auf die Funktion dieses Enzymes zu quantifizieren. Erhebliche Änderungen in der chemischen Zusammensetzung der zellulären Umgebung können die Funktionsweise von Proteinen gefährden (Missfaltung, Aggregation), könnten aber auch als Regelmechanismus dienen.

Structure and function of proteins are predominantly investigated *in vitro*, in environments ranging from dilute solution to cryogenic crystals. These results are extrapolated to explain function in the living cell, generally without the ability to directly compare the cellular environment with *in vitro* conditions. We developed the temperature-jump fluorescence microscope (Fast Relaxation Imaging, FReI) to spatio-temporally resolve fast biomolecular kinetics and stability inside a single living cell. We demonstrated the method by measuring the reversible fast folding kinetics as well as folding thermodynamics of a fluorescent phosphoglycerate kinase fusion protein in a bone marrow cell. The same instrument was also used to perform the comparative *in vitro* measurement in dilute buffer and crowded environments. Variations in the cytoplasmic environment are important modulators of protein stability and dynamics. Cytoplasmic energy landscape modulation may be a candidate for non-genetic regulation of proteins but also challenges protein homeostasis.

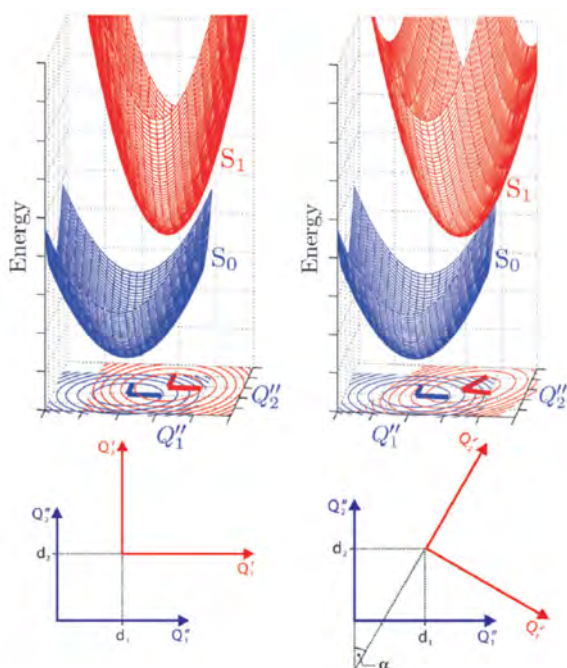
Christian W. Müller

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

Tel.: +49-(0)234-24237; Fax: +49-(0)234-14183

Email: christian.w.mueller@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/pc2/mueller>

C. W. Müller, J. J. Newby, C.-P. Liu, C. P. Rodrigo, T. S. Zwier. *PCCP* 12 (2010) 2331-2343. Duschinsky mixing between four non-totally symmetric normal coordinates in the S_1 - S_0 vibronic structure of (*E*)-phenylvinylacetylene: A quantitative analysis



Die Potentialflächen vielatomiger Moleküle sind nicht nur durch unterschiedliche Kraftkonstanten und Gleichgewichtsabstände charakterisiert, sondern auch durch eine Rotation gegeneinander. (*E*)-Phenylvinylacetylene weist infolge der längeren konjugierten Seitenkette eine gegenüber Styrol beträchtlich komplexere Duschinsky-Rotation auf. Quantitative Fluoreszenzintensitätsanalyse zeigt, dass die vier niederfrequentesten nicht-totalsymmetrischen Schwingungen ihren Bewegungscharakter infolge Duschinsky-Mischens nach elektronischer Anregung $S_1 \leftarrow S_0$ ändern. Die Intensitäten von 182 Kombinations- und Obertönen in sieben Fluoreszenz-dispersionsspektren wurden mit sieben Parametern unter Minimierung der Fehler-quadrate angepasst. Die vierdimensionalen Franck-Condon-Überlappintegrale wurden

mittels einschlägiger Rekursionsbeziehungen zwischen harmonischen Wellenfunktionen berechnet. Die abschließende Berechnung aller 434 dipol-erlaubten Kombinations- und Obertöne für Quantenzahlen bis $v = 4$ zeigte bis auf wenige Ausnahmen sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Intensitäten. Einige häufig verwendete quantenchemische Methoden für die Berechnung angeregter Zustände geben jedoch die experimentell beobachtete Duschinsky-Rotation nicht quantitativ wieder.

In polyatomic molecules, radiatively or non-radiatively coupled potential energy surfaces not only show different distortions (reflecting different force constants) and displacements (reflecting different equilibrium geometries), but are also rotated relative to one another (reflecting vibrational mixing). The complexity of this Duschinsky mixing is considerably increased in (*E*)-phenylvinylacetylene relative to that of its parent styrene due to the longer conjugated side chain. Here we quantitatively analyze this change of the motional character of the four lowest-frequency out-of-plane vibrations upon electronic excitation $S_1 \leftarrow S_0$. The peak intensities of 182 overtone and combination transitions spread over seven dispersed fluorescence spectra were fit simultaneously with seven parameters in an automated least-squares fitting procedure. The required four-dimensional Franck-Condon overlap integrals were calculated using previously reported recursion relations between harmonic oscillator wavefunctions. As a consistency check, the intensities of all possible 434 electric dipole allowed overtone and combination bands up to individual vibrational quantum numbers of $v = 4$ were simulated. The comparison with the experimental intensities revealed with few exceptions very good agreement. Our Duschinsky mixing analysis, however, reveals a challenging complexity that is not quantitatively reproduced by widely used excited state quantum chemical methods such as CIS, TD-B3LYP, and TD-BP86.

Hermann Weingärtner

Phys. Chemie II – Phys. Chemie der Flüssigkeiten;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3225535; FAX: ++49-(0)234-321493
email: hermann.weingaertner@rub.de

D. Constantinescu, C. Herrmann, H. Weingärtner, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **11** (2010) 1756-1763. Patterns of protein unfolding and protein aggregation in ionic liquids (cover paper of the themed issue on the physical chemistry of ionic liquids).

Die Arbeit beschreibt den Effekt ionischer Flüssigkeiten – niedrig schmelzender organischer Salze – auf die Stabilität von Proteinen in wässrigen Lösungen mit Bezug auf die thermische Denaturierung, Proteinaggregation und Bildung von Faltungsintermediaten. Sorgsam ausgewählte ionische Flüssigkeiten können Proteine thermisch stabilisieren, die Proteinaggregation unterdrücken und zur Steuerung von Faltungsintermediaten eingesetzt werden.



The paper describes the effect of ionic liquids – low-melting organic salts – on the stability of proteins in aqueous solutions with regard to thermal denaturation, protein aggregation and the formation of folding intermediates. Carefully selected ionic liquids can result in the thermal stabilization of proteins, suppress protein aggregation and steer the formation of folding intermediates.

Wolfgang Schuhmann

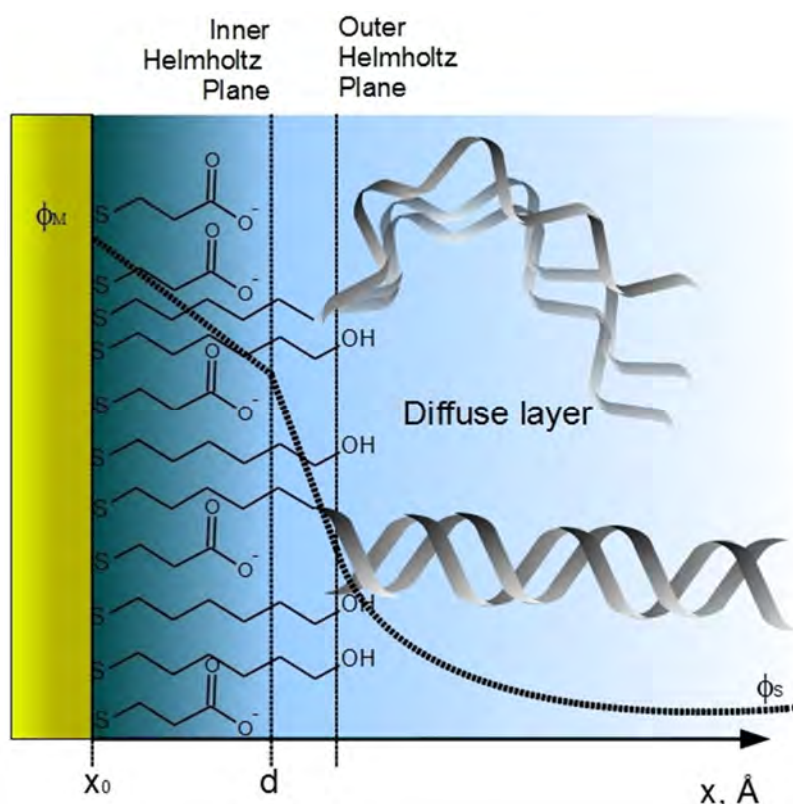
Lehrstuhl für Analytische Chemie - Elektroanalytik & Sensorik;

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>

M. Gębala, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **11** (2010) 2887–2895. Controlled orientation of DNA in a binary SAM as a key for the successful determination of DNA hybridization by means of electrochemical impedance spectroscopy



Die Detektion von DNA-Hybridisierung an Elektrodenoberflächen, die mit einer Monoschicht aus Fängersequenzen einer thiol-funktionalisierten einzelsträngigen DNA (ssDNA) sowie kurzkettigen Thiolderivaten modifiziert ist, mittels elektrochemischer Impedanzspektroskopie erfordert ein definiertes Design der Elektrode/Elektrolyt Grenzfläche sowie ein tiefes Verständnis der Prozesse, die während der Hybridisierung mit der komplementären DNA-Sequenz an der Phasengrenze ablaufen. Der Einfluss des Elektrodenpotentials, der Belegung mit ssDNA, der

Ionenstärke, der spezifischen Eigenschaften der Thiolderivate und insbesondere der Debye-Länge wurde hinsichtlich ihres Einflusses auf die Impedanzspektren untersucht. Eine gemischte Monoschicht, die zusätzlich zur ssDNA sowohl mit Mercaptohexanol als auch Mercaptopropionsäure nachbelegt wurde, wird als Interfacedesign vorgeschlagen, das sowohl eine hocheffiziente DNA-Hybridisierung gleichzeitig mit einer Modulation des Ladungstransferwiderstandes des Interfaces nach der Hybridisierung ermöglicht.

Determination of DNA hybridization at electrode surfaces modified with thiol-tethered single-stranded DNA (ssDNA) capture probes and co-assembled with short-chain thiol derivatives using electrochemical impedance spectroscopy requires a careful design of the electrode/electrolyte interface as well as an in depth understanding about the processes at the interface during DNA hybridization. The influence of the electrode potential, the ssDNA coverage, the ionic strength, the nature of the thiol derivative and especially the Debye length are shown to have a significant impact on the impedance spectra. A mixed monolayer comprising in addition to the ssDNA capture probe both mercaptohexanol (MCH) as well as mercaptopropionic acid (MPA) is suggested as an interface design which allows a high efficiency of the DNA hybridization concomitantly with a reliable modulation of the charge-transfer resistance of the electrode upon hybridization.

William S. Sheldrick

Analytische Chemie – Analytische Biokoordinationschemie & Strukturchemie

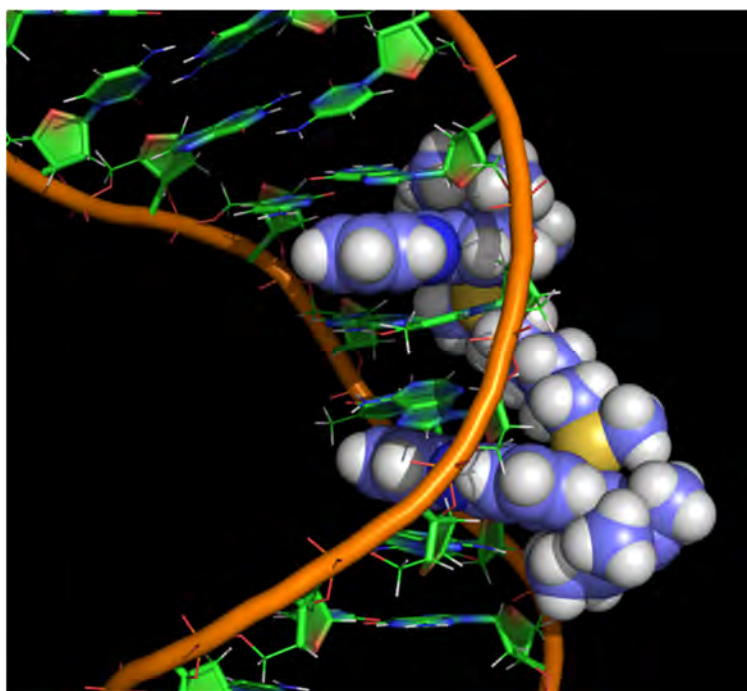
Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

Tel: +49(0)234-3228019; Fax: +49-(0)234-3214420

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

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

M. Kokoschka, J.-A. Bangert, R. Stoll, W. S. Sheldrick, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2010) 1507 - 1515. Sequence-selective organoiridium DNA bis-intercalators with flexible dithiaalkane linker chains



Die Kopplung eines Interkalators mit einem zweiten funktionellen Fragment, das interkalativ oder koordinativ binden kann, bietet eine attraktive Strategie zur Steigerung der Affinität DNA-Wechselwirkungen. Wir konnten nun zeigen, dass die gezielte Verknüpfung organometallischer Fragmente $\{(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{Ir}(\text{dppz})\}^{2+}$ durch flexible Dithiaalkane $\text{CH}_3\text{-S}(\text{CH}_2)_n\text{SCH}_3$ ($n = 5, 6$) zu Bis-Interkalatoren führt, die auch potente Antitumor-Mittel sind. Die NMR Strukturanalyse (rMD-Simulation) eines äquimolaren Ansatzes mit dem GC-reichen doppelsträngigen Dekanukleotid d(5'-GCGCATCGGC-3') weist

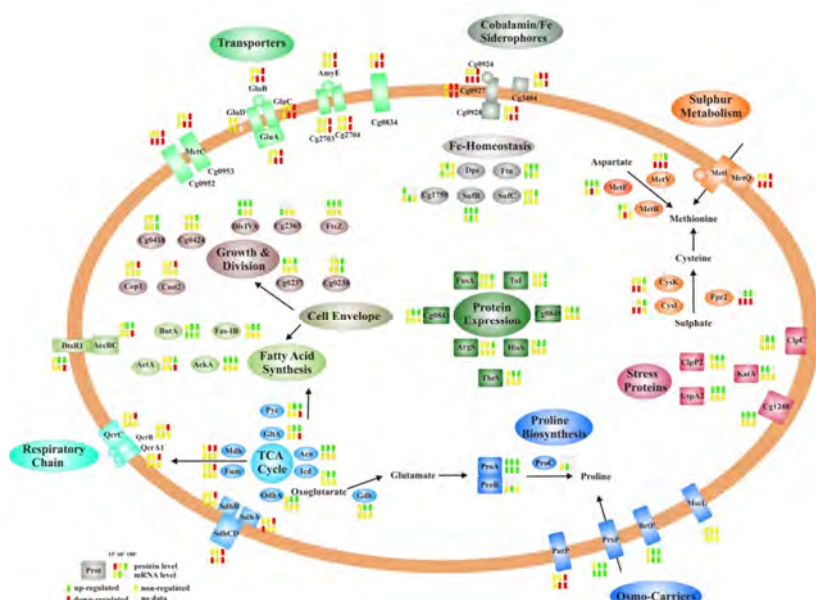
daraufhin, dass der dinukleare Komplex mit $n=6$ selektiv die zentrale AT Basensequenz von der kleinen Furche aus umschließt. Aufgrund des großen Raumanpruches des Cp^* -Liganden wird eine starke Krümmung der DNA Doppelhelix weg von dem Organoiridium-Komplex beobachtet. Gegen humane MCF-7 Zellen (Brustkarzinom) weist der Bis-Interkalator eine hohe antiproliferative Aktivität von $\text{IC}_{50} = 1.05 \pm 0.17 \mu\text{M}$ auf.

An attractive design strategy to enhance both the affinity and specificity of DNA interactions is to join an intercalator with another functional group such as a second intercalator or a fragment capable of coordinative binding to the nucleobases. We have now demonstrated that linking organometallic fragments $\{(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{Ir}(\text{dppz})\}^{2+}$ through flexible dithiaalkanes $\text{CH}_3\text{S}(\text{CH}_2)_n\text{SCH}_3$ ($n = 5, 6$) leads to effective bis-intercalators, that are also potent anticancer agents. An NMR structural analysis (rMD simulation) for its 1:1 mixture with the GC-rich double-stranded decanucleotide d(5'-GCGCATCGGC-3') showed that the dinuclear complex with $n = 6$ selectively clamps the central AT base sequence from the minor groove. As a result of the steric demands of the bulky Cp^* ligand, the DNA double helix is severely distorted in the direction pointing away from the organoiridium complex. The bis-intercalator exhibits a pronounced antiproliferative activity of $\text{IC}_{50} = 1.05 \pm 0.17 \mu\text{M}$ towards human MCF-7 cells (breast carcinoma).

Dirk Wolters

Anal. Chem. – Biomolekulare Massenspektrometrie; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum; Tel.: ++49-(0)234-3225463; FAX: ++49-(0)234-3214742
email: Dirk.Wolters@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/bioms>

B. Fränzel, C. Trötschel, C. Rückert, J. Kalinowski, A. Poetsch, D.A. Wolters, *Proteomics* **10** (2010), 445-457, Adaptation of *Corynebacterium glutamicum* to salt-stress conditions



Corynebacterium glutamicum ist biotechnologisch eines der bedeutendsten Mikroorganismen, da große Mengen Aminosäuren extrazellulär angereichert werden. Deswegen besitzt *C. glutamicum* effektive Strategien zur Anpassung an hypo- und hyperosmotische Stressbedingungen.

Hierzu gelang es einen umfassenden Überblick über die quantitative Dynamik von *C. glutamicum* bei Salzstress auf Transkriptom- und Proteomebene zu geben. Der Prolin Importer ProP ist dabei am stärksten reguliert, da dieser eine entscheidende Rolle bei der

hyperosmotischen Streßbewältigung spielt. Interessant ist die auffällige Regulation von Proteinen, die an der Lipidbiosynthese der Zellhülle beteiligt sind. Dieses Ergebnis wird durch Viskositätsmessungen und Analyse der Lipidzusammensetzung unterstützt, die eine deutlich klebrigere und viskosere Zellhülle nachweisen. Zahlreiche Membranproteine sind dabei nach Salzstress herunterreguliert, was insgesamt einen ausgeklügelten Schutzmechanismus darstellt. Entgegen der Darstellung in der Literatur, konnte weder oxidativer Stress, noch Eisenmangel nachgewiesen werden.

Corynebacterium glutamicum is one of the biotechnologically most important microorganisms because of its ability to enrich amino acids extracellularly. Hence, *C. glutamicum* requires effective adaptation strategies against both hypo- and hyperosmotic stress. We give a comprehensive and coherent outline about the quantitative dynamics of *C. glutamicum* during adaptation to hyperosmotic stress at the transcript and protein levels. The osmolyte-carrier ProP, playing a pivotal role in hyperosmotic stress defence, exhibits the strongest up-regulation of all proteins. A conspicuously regulated group comprises proteins involved in lipid biosynthesis of the cell envelope. This is in accordance with our observation of a more viscous and stickier cell envelope, which is supported by the findings of an altered lipid composition. Together with our results, showing that several transporters were down-regulated, this membrane adaptation appears to be one of *C. glutamicum*'s major protection strategies against hyperosmotic stress. In addition, we demonstrate that no oxidative stress and no iron limitation occur during salt stress contrary to former postulations. Ultimately, it is remarkable that various proteins with divergent mRNA-protein dynamics and regulation have been observed. This leads to the assumption, that there are still unknown mechanisms in between the bacterial transcription, translation and posttranslation waiting to be unravelled.

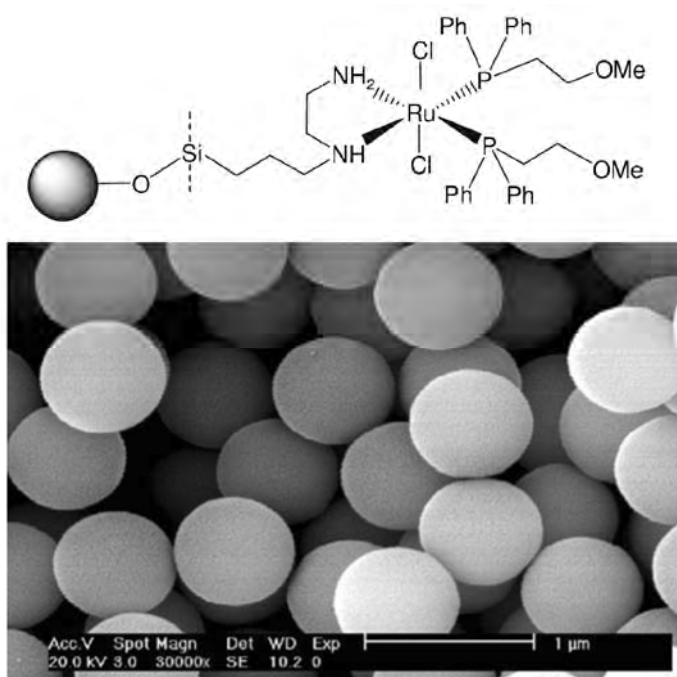
Nicolas Plumeré

Anal. Chem. – Center for Electrochemical science; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum; Tel.: ++49-(0)234-3229434

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

F. Novak, N. Plumeré, B. Schetter, B. Speiser, D. Straub, H. A. Mayer, M. Reginek, K. Albert, G. Fischer, C. Meyer, H.-J. Egelhaaf and B. Børresen, *J. Solid State Electrochem.* **14** (2010) 289-303. Redox-active silica nanoparticles. Part 4. Synthesis, size distribution, and electrochemical adsorption behavior of ferrocene- and (diamine)(diphosphine)-ruthenium(II)-modified Stöber silica colloidal particles.

Toward electrochemical control of Noyori type catalysts: Nonporous spherical silica



particles resulting from a redesigned Stoeber process are covalently modified with redox-active ruthenium (II) complex with an N₂P₂Cl₂ ligand set via a flexible spacer. The ruthenium (II) complex remains catalytically active with respect to hydrogenation upon immobilization on the particles. Thus, the respective material provides a heterogenized homogeneous hydrogenation catalyst on a solid support. The adsorption and cyclic voltammetric behavior is studied in detail and reveals effects of charge transport by electron hopping along the surface of particles adsorbed on a Pt electrode. This opens the possibility to control the hydrogenation reaction electrochemically.

Auf dem Weg zu elektrochemisch kontrollierten Noyori Katalysatoren: An die Oberfläche von nicht-porösen sphärischen SiO₂-Partikeln aus dem Stöber Prozess wird über einen flexiblen Spacer ein redox-aktiver Ruthenium (II) Komplex mit N₂P₂Cl₂ Koordinationsumgebung gebunden. Die katalytische Aktivität des Ruthenium (II) Komplexes in Hydrierungsreaktionen bleibt dabei erhalten. Der auf dem Trägermaterial immobilisierte Komplex eignet sich damit auch für heterogen katalysierte Hydrierungen. Eingehende Untersuchungen der Adsorption an Pt-Elektroden und der elektrochemischen Eigenschaften des Materials zeigen, dass Ladung durch einen Mechanismus des *electron hopping* entlang der Oberfläche der Partikel transportiert wird. Dies ermöglicht die elektrochemische Kontrolle der Hydrierungsreaktion.

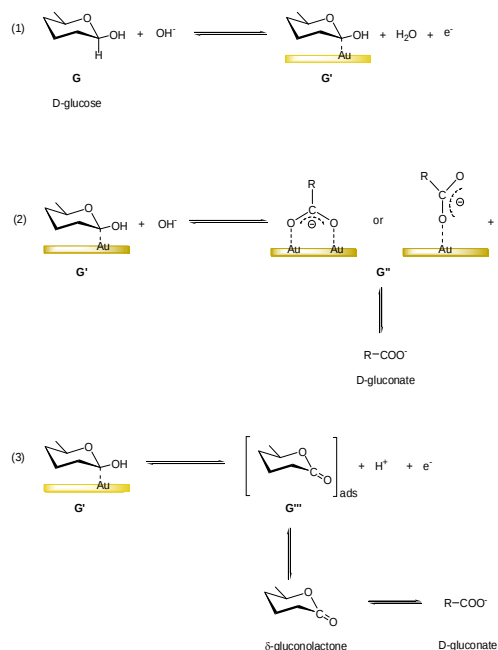
Fabio La Mantia

Anal. Chem. - Zentrum für Elektrochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3229432; FAX: ++49-(0)234-3214683

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

M. Pasta, F. La Mantia, Y. Cui, *Electrochimica Acta* 55 (2010) 5561-5568. Mechanism of glucose electrochemical oxidation on gold surface



The complex oxidation of glucose at the surface of gold electrodes was studied in detail in different conditions of pH, buffer and halide concentration. As observed in previous studies, an oxidative current peak occurs during the cathodic sweep showing a linear dependence on glucose concentration, when other electrolyte conditions are unchanged. The effect of the different conditions on the intensity of this peak has stressed the limitations of the previously proposed mechanisms. A new mechanism able to explain the presence of this oxidative peak was proposed. The mechanism takes into account ion-sorption and electrochemical adsorption of OH^- , buffer species ($\text{K}_2\text{HPO}_4/\text{KH}_2\text{PO}_4$) and halides. The mechanism consider that the surface of gold, passivated by the presence of $\text{Au}(\text{OH})_3$ at anodic potentials, is then cleaned from other species in solution and ready to

react with glucose during the cathodic scan, when the surface is reduced back to gold. It has been demonstrated through electrochemical impedance spectroscopy that halides adsorb at the surface of gold and remove active sites for the oxidation of gold, thus decreasing its activity.

Die komplexe Oxidation von Glucose an der Oberfläche von Goldelektroden wurde im Detail unter unterschiedlichen Bedingungen wie pH-Wert, Puffer und Halogenidkonzentration untersucht. Ein oxidativer Strompeak während des kathodischen Scans wird beobachtet, der eine lineare Abhängigkeit von der Glucosekonzentration aufweist, wenn die Elektrolytzusammensetzung unverändert ist. Der Einfluss der Elektrolytzusammensetzung auf den Strompeak zeigt die Grenzen des früher vorgeschlagenen Reaktionsmechanismus, so dass hier ein neuer Mechanismus, der das Auftreten des oxidativen Peaks erklärt, vorgeschlagen wird. Der Mechanismus berücksichtigt die Ionensorption und die elektrochemische Adsorption von OH^- , Pufferkomponenten ($\text{K}_2\text{HPO}_4/\text{KH}_2\text{PO}_4$) und Halogenidionen. Es wird berücksichtigt, dass die Goldoberfläche, die durch das Vorhandensein von $\text{Au}(\text{OH})_3$ bei anodischen Potentialen passiviert ist, von anderen in der Lösung vorhandenen Spezies gereinigt wird und dadurch bereit ist, genau dann mit Glucose zu reagieren, wenn die Oberfläche zu metallischem Gold reduziert wird. Mittels elektrochemischer Impedanzspektroskopie konnte gezeigt werden, dass Halogenidionen an der Goldoberfläche adsorbieren und dadurch Zentren für die Oxidation von Gold blockieren. Dadurch wird die Aktivität verringert.

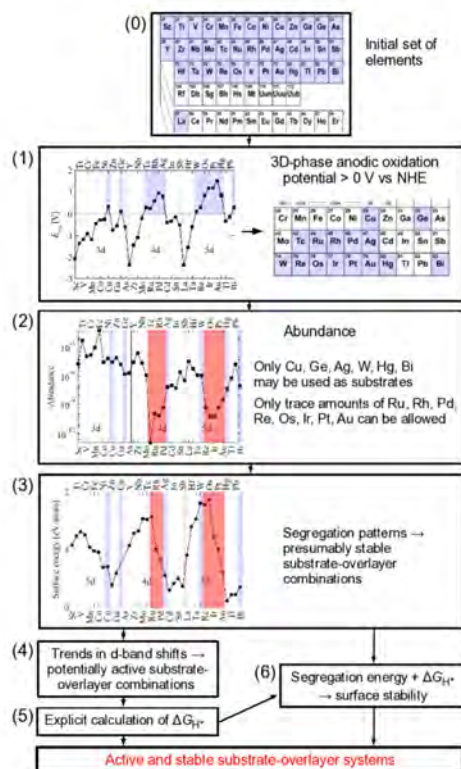
Aliaksandr Bandarenka

Center for Electrochemical Sciences; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: +49-(0) 234 3229432; FAX: +49-(0)234-3214683

email: aliaksandr.bandarenka@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ces>

M.E. Björketun, A.S. Bondarenko, B.L. Abrams, I. Chorkendorff, J. Rossmeisl, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** (2010) 10536–10541. Screening of electrocatalytic materials for hydrogen evolution.



An exhaustive theoretical screening for cheap and stable binary-surface-alloy hydrogen evolution catalysts has been carried out. The alloys were formed by combining elements from a pool of 39 elemental metals, most of them transition metals. In order to keep the computational work manageable the investigation was limited to substrate-overlayer systems, which can be viewed as an extreme type of surface alloy. In addition to this restriction, elements whose anodic oxidation potential does not exceed 0 V vs. NHE were excluded from the study and to ensure low materials cost only abundant elements were allowed as constituents of the substrate. The most promising system identified in the screening, subject to these constraints, is a W-Cu substrate-overlayer system; it was synthesized and its hydrogen evolution properties were evaluated by means of cyclic voltammetry. Improvement over pure W and Cu electrodes was observed, which suggests that the DFT-based search method indeed has predictive power. The introduced scheme can be readily modified to target other electrochemical reactions.

Ein umfassendes theoretisches Screening hinsichtlich kostengünstiger und stabiler binärer Oberflächenlegierungen als Katalysatoren für die Wasserstoffentwicklung wurde durchgeführt. Die Legierungen wurden durch Kombination von 39 metallen, zumeist Übergangsmetalle, gebildet. Um den Berechnungsaufwand in Grenzen zu halten, wurde die Berechnung auf sogenannte „substrate overlayer“ Systeme limitiert, die als extremer Typ von Oberflächenlegierungen aufgefasst werden können. Zusätzlich zu dieser Einschränkung wurden Elemente, die ein anodisches Oxidationspotential aufweisen, das kleiner als 0 V vs NHE ist, von der Studie ausgeschlossen, um zu garantieren, dass geringe Materialkosten durch ein ausreichendes Vorkommen der Metalle gewährleistet ist. Das vielversprechendste System, das in dem theoretischen Screeningprozess identifiziert werden konnte, ist das W-Cu „substrate overlayer“ System. Das System wurde synthetisiert und seine Eigenschaften hinsichtlich der Wasserstoffentwicklung wurden mittels cyclischer Voltammetrie charakterisiert. Eine Verbesserung im Vergleich mit reinem W oder Cu konnte gezeigt werden, die nahelegt, dass ein auf DFT basierendes Screening tatsächlich geeignet ist, Katalysatorstrukturen vorherzusagen. Die DFT Screeningmethode kann an weitere elektrochemische Reaktionen angepasst werden.

Dominik Marx

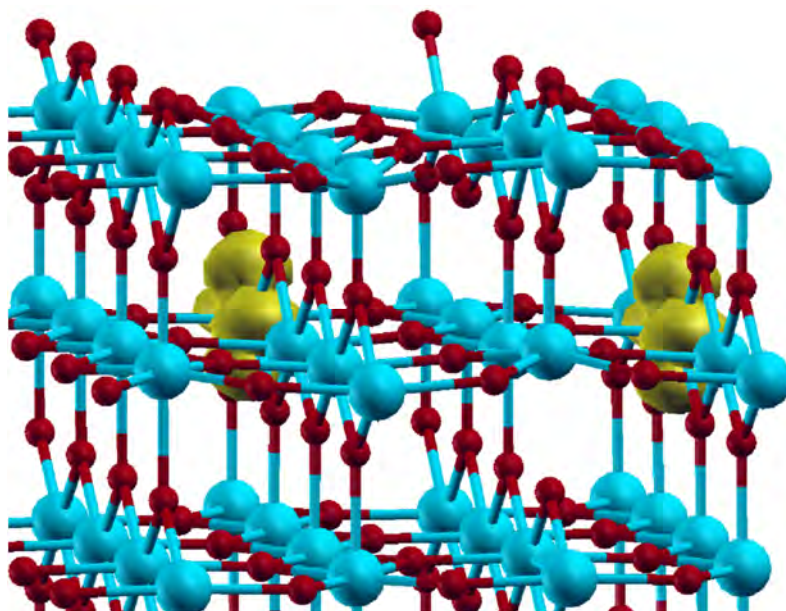
Lehrstuhl für Theoretische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

P. M. Kowalski, M. Farnesi Camellone, N. N. Nair, B. Meyer, and D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 146405. Charge Localization Dynamics Induced by Oxygen Vacancies on the $\text{TiO}_2(110)$ Surface

Die Dynamik eines durch eine Sauerstofffehlstelle erzeugten Farbzentraums auf der $\text{TiO}_2(110)$ Rutiloberfläche wurde mit ab initio Molekulardynamik untersucht. Diese Simulationen fördern ein komplexes, zeitabhängiges Verhalten von fluktuierenden Elektronenlokalisierungstopologien in der Nähe der Sauerstofffehlstelle zu Tage. Obwohl die beiden Überschusselektronen bevorzugt die zweite Atomlage unterhalb der Oberfläche bevölkern sind diese auch ab und zu direkt an der Oberfläche, aber auch in der dritten Atomlage zu finden. Dieses dynamische Verhalten der Überschussladung erklärt bislang widersprüchliche Interpretationen sowohl von theoretischen als auch experimentellen Daten.



The dynamics of an F-center created by an oxygen vacancy on the $\text{TiO}_2(110)$ rutile surface has been investigated using ab initio molecular dynamics. These simulations uncover a truly complex, time-dependent behavior of fluctuating electron localization topologies in the vicinity of the oxygen vacancy. Although the two excess electrons are found to populate preferentially the second subsurface layer, they occasionally visit surface sites and also the third subsurface layer. This dynamical behavior of the excess charge explains hitherto conflicting interpretations of both theoretical findings and experimental data.

Mediathek des Lehrstuhls mit weiteren Glanzlichtern:

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

Jörg Behler

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

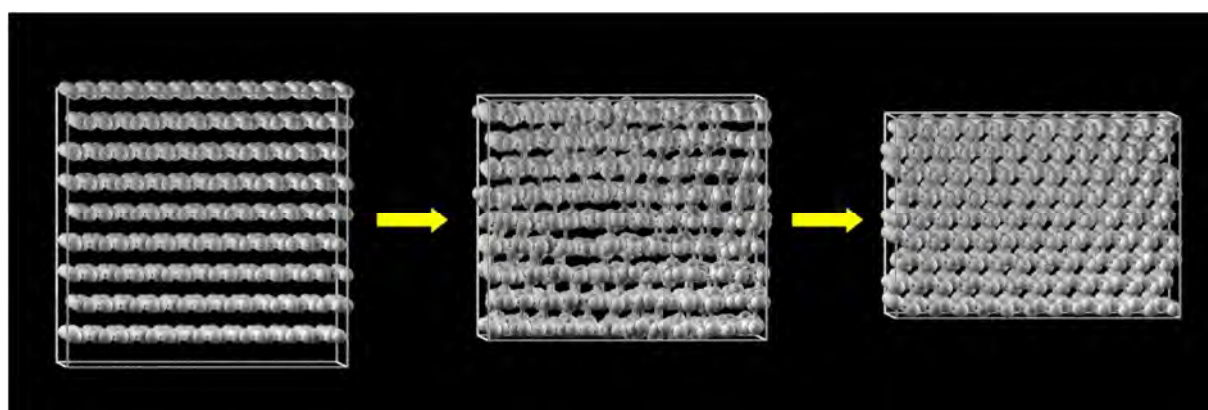
Tel.: ++49-(0)234-3226749; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: joerg.behler@theochem.rub.de; <http://www.theochem.rub.de>

R. Z. Khaliullin, H. Eshet, T. D. Kühne, J. Behler, M. Parrinello, *Phys. Rev. B* **83** (2010) 100103. Ab initio quality study of the graphite-diamond phase coexistence

Aufgrund seiner Fähigkeit, starke chemische Bindungen mit einer Vielzahl verschiedener Koordinationszahlen zu bilden, besitzt Kohlenstoff eine Reihe von Modifikationen mit sehr unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften. Trotz der großen technischen Bedeutung der zwei wichtigsten Modifikationen, Diamant und Graphit, sind eine Reihe von Eigenschaften dieser Phasen und die Mechanismen ihrer gegenseitigen Umwandlung jedoch bisher nur unvollständig verstanden. Insbesondere Untersuchungen bei hohen Drücken und Temperaturen sind experimentell nur schwer durchführbar.

In der vorliegenden Arbeit wurde mit Hilfe künstlicher neuronaler Netze (NN) ein Potential zur Beschreibung der atomaren Wechselwirkungen in Diamant und Graphit entwickelt, das auf Dichtefunktionalrechnungen basiert. Das NN Potential kombiniert die Genauigkeit einer quantenmechanischen Beschreibung beider Phasen mit der Effizienz konventioneller empirischer Kraftfelder. Es erlaubt daher die detaillierte Untersuchung der Thermodynamik der Phasenumwandlung unter extremen Bedingungen.



The ability of carbon atoms to form strong chemical bonds with a variety of coordination numbers leads to a remarkably wide range of physical properties of the condensed phases of carbon. In spite of the great fundamental and practical importance of graphite and diamond the characterization of these phases and their mutual transformation is far from complete especially in the region of high pressures and temperatures which are difficult to access experimentally.

In the present work an interatomic potential for the diamond and graphite phases of carbon has been constructed using a neural network (NN) representation of the density functional theory potential energy surface. The NN potential combines the accuracy of a first-principles description of both phases with the efficiency of empirical force fields and allows one to perform a molecular dynamics study of ab initio quality of the thermodynamics of the graphite-diamond coexistence. The obtained results are in excellent agreement with experimental data.

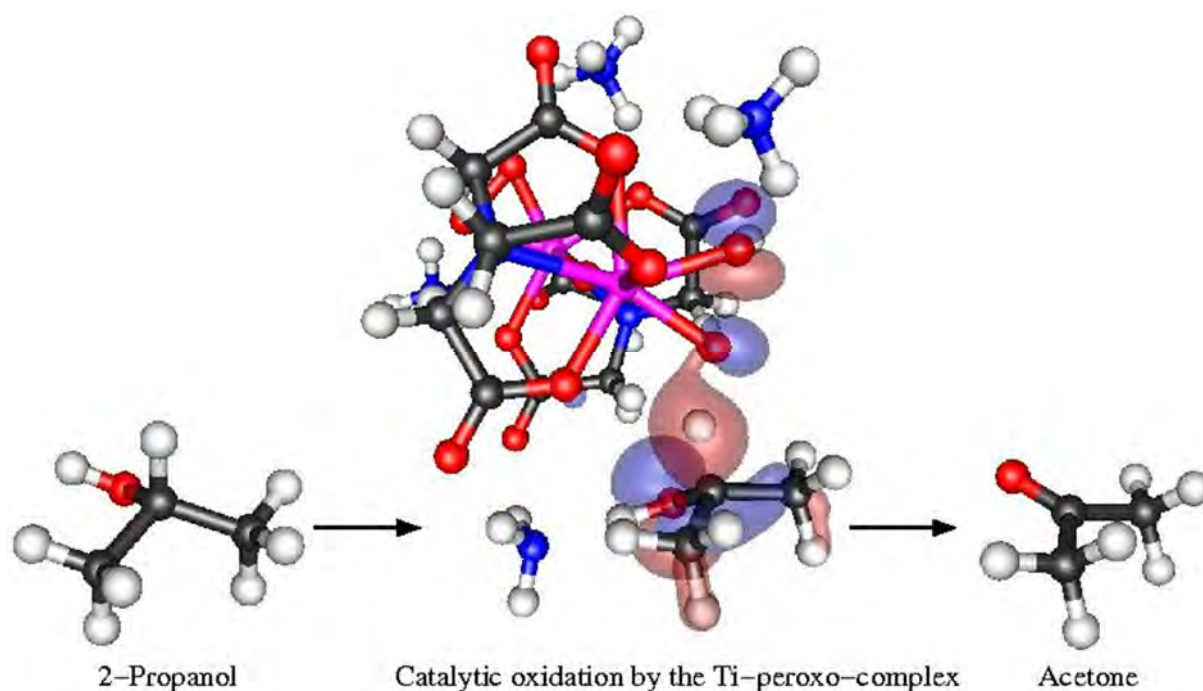
Christof Hättig

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

Tel.: ++49-(0)234-3226485; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: christof.haettig@rub.de; <http://www.theochem.rub.de/research/haettig>

D. H. Frieze, C. Hättig, M. Rohe, K. Merz, A. Rittermeier, M. Muhler, *J. Phys. Chem. C* **114** (2010) 19415-19418. Oxidation of 2-propanol by peroxo titanium complexes: A combined experimental and theoretical study



Die Oxidation von 2-Propanol durch Titan-peroxo-Komplexe wird im Zusammenspiel von Synthese, Spektroskopie und Berechnung untersucht. Quantenchemische Berechnungen führen zu dem Ergebnis, dass die Peroxogruppe durch intermediäre Protonierung als Elektrophil aktiviert wird. Diese kurzlebige Spezies kann in einem konzertierten Schritt zwei Elektronen und ein Proton vom sekundären C-Atom des 2-Propanols abgeben. Gleichzeitig wird eine Carbonylgruppe ausgebildet und das Hydroxylproton ans Lösungsmittel abgegeben. Im Einklang mit den Berechnungen zeigt sich im Experiment, dass die Aktivität des Titan-Peroxo-Komplexes als Oxidationsmittel vom pH-Wert des Reaktionsmediums abhängt.

The oxidation of 2-propanol by titanium peroxo complexes is investigated in a combined synthetic, spectroscopic and computational study. We find in quantum chemical calculations for the thermal reaction in protic solvents that the temporary protonation of the peroxo group activates the latter as electrophile. This transient species is amenable to a concerted transfer of two electrons and a proton from the secondary C-atom of 2-propanol. Simultaneously, the carbonyl group is formed and the alcoholic proton is transferred to the solvent. In line with the results of the calculations, we find experimentally that the activity of the titanium peroxo complexes as oxidant depends on the pH value of the reaction medium.

Werner Kutzelnigg

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

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

e-mail: Werner.Kutzelnigg@rub.de

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

Andrew C. Simmonett, Jeremiah J. Wilke, Henry F. Schaefer III, Werner Kutzelnigg, *J. Chem. Phys.* **133**, 174122 (2010). Density Cumulant Functional Theory: First Implementation and Benchmark Results for the DCFT-06 Model.

Die Dichte-Kumulanten-Funktional-Theorie [Density Cumulant Functional Theory, DCFT, W. Kutzelnigg, *J. Chem. Phys.* **125**, 171101 (2006)] wurde erstmalig implementiert. 'Benchmark' Ergebnisse für Atome und zweiatomige Moleküle werden vorgestellt, die die Leistungsfähigkeit des DCFT-06 Funktional demonstrieren, sowohl für bindende als auch für nicht-bindende Wechselwirkungen. Die Ergebnissn zeigen, dass DCFT-06 ähnlich leistungsfähig zur Beschreibung der Dispersions-Wechselwirkung ist wie 'coupled-cluster' mit 'single and double excitations' (CCSD). Für kovalent gebundene Systeme haben die mit DCFT-06 vorhergesagten physikalischen Eigenschaften zumindest CCSD Qualität, sind aber in der Nähe der Gleichgewichts-Geometrien oft vergleichbar mit CCSD mit störungstheoretischen Dreifach-Anregungen [CCSD(T)]. Der Rechenaufwand von DCFT-06 skaliert mit $O(N^6)$ wie bei CCSD, hat aber einen kleineren Vorfaktor, was attraktiv ist.

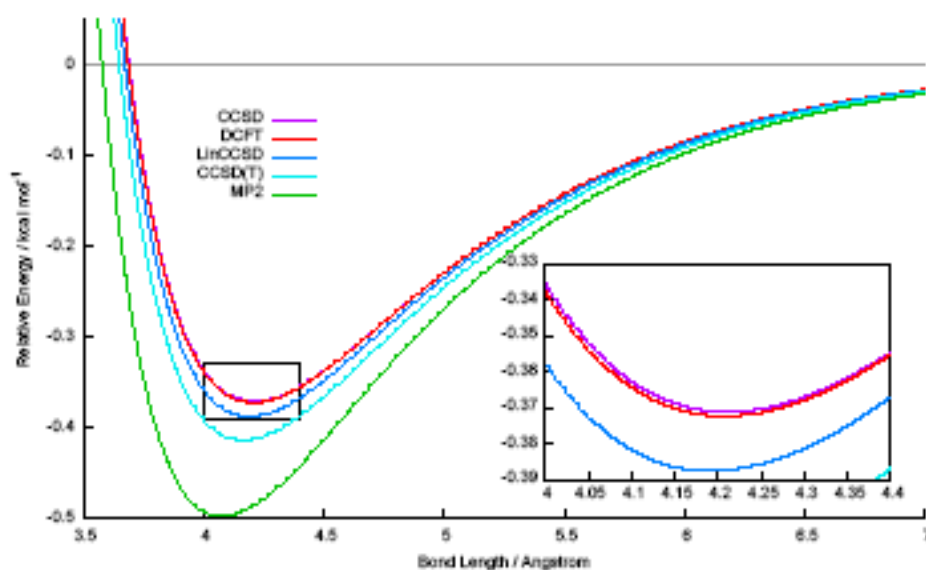


Figure:
The counterpoise-corrected aug-cc-pVDZ binding energy of the krypton dimer, as a function of bond length, at various levels of theory.

Density Cumulant Functional Theory [W. Kutzelnigg, *J. Chem. Phys.* **125**, 171101 (2006)] is implemented for the first time. Benchmark results are provided for atoms and diatomics, demonstrating the performance of DCFT-06 for both non-bonded and bonded interactions. The results show that DCFT-06 appears to perform similarly to coupled cluster theory with single and double excitations (CCSD) in describing dispersion. For covalently bound systems, the physical properties predicted by DCFT-06 appear to be at least of CCSD quality, often providing values competitive with CCSD with perturbative triple excitations [CCSD(T)] around equilibrium geometries. The computational scaling of both DCFT-06 and CCSD is $O(N^6)$, but the former has a smaller prefactor making it an attractive alternative.

Volker Staemmler

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

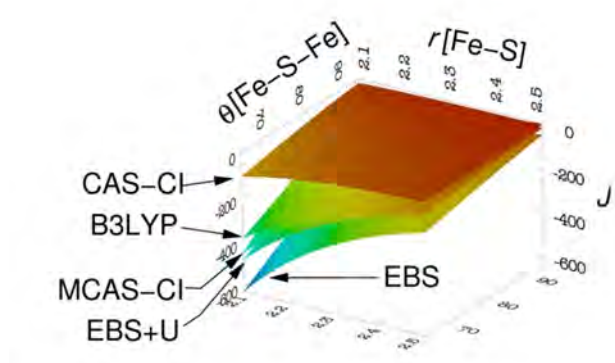
Tel.: ++49-(0)234-3226752; FAX: ++49-(0)234-3214045

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

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

S. A. Fiethen, V. Staemmler, N. N. Nair, J. Ribas-Arino, E. Schreiner, D. Marx, *J. Phys. Chem. B* **114** (2010) 11612. Revealing the magnetostructural dynamics of [2Fe-2S] ferredoxins from reduced-dimensionality analysis of antiferromagnetic exchange coupling fluctuations

Das magnetische Verhalten von [2Fe-2S] Ferredoxinen wird durch ihren anorganischen Fe_2S_2 Kern bestimmt, der zwei schwefel-verbrückte Fe^{3+} Kationen enthält. Diese sind antiferromagnetisch gekoppelt; die Austausch-Kopplungskonstante J hängt im wesentlichen nur vom Fe-S-Abstand r und vom Fe-S-Fe-Winkel θ ab. Das erlaubt es, zunächst mithilfe quantenchemischer Methoden zweidimensionale „J-Flächen“, $J(r, \theta)$, zu berechnen und diese geeignet zu parametrisieren. (In dieser Studie wurden fünf verschiedene Methoden verwendet, CAS-CI, MCAS-CI, B3LYP, EBS und EBS+U; die erhaltenen J-Flächen sind in der Abbildung gezeigt). Kombiniert man diese parametrisierten J-Flächen dann mit Dynamik-Simulationen der Proteinbewegung, so erhält man ein detailliertes Bild der magnetostrukturellen Dynamik des Ferredoxins, ohne dass die aufwendige Berechnung von J an jedem einzelnen Zeitschritt der Simulation durchgeführt werden muss.



The magnetic behaviour of [2Fe-2S] ferredoxins is determined by their inorganic Fe_2S_2 core which contains two sulfur-bridged Fe^{3+} cations. They are coupled antiferromagnetically, the exchange coupling constant J depends nearly exclusively only on the Fe-S distance r and the Fe-S-Fe angle θ . This behaviour allows calculating first by means of quantum-chemical methods two-dimensional “J-surfaces” which are then fitted to a simple functional form. (In the present study five different methods were used, CAS-CI, MCAS-CI, B3LYP, EBS, and EBS+U, the respective J-surfaces are shown in the figure.) The combination of these parameterized J-surfaces with dynamics simulations of the protein movement leads to a detailed understanding of the magnetostructural dynamics of the ferredoxin, without the necessity to perform the expensive calculation of J at each time step of the simulation.

Martin Muhler

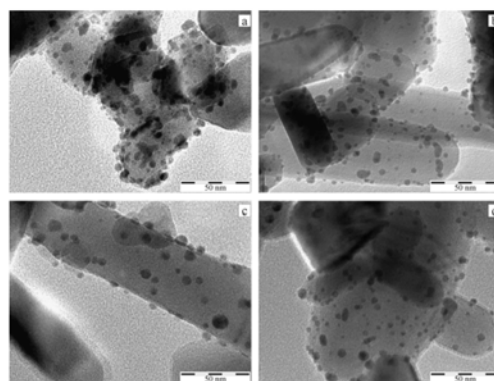
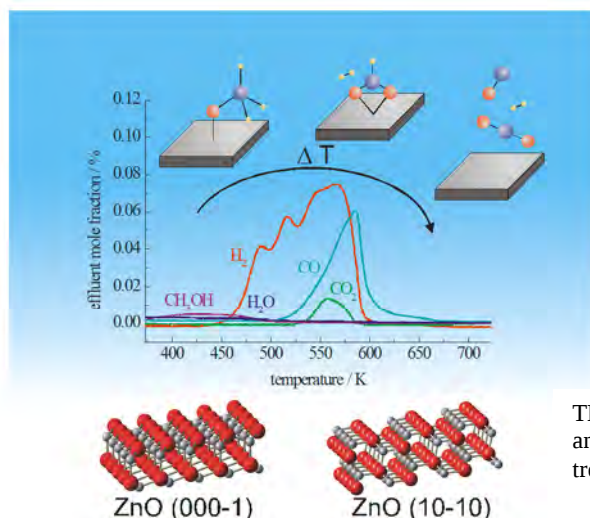
Lehrstuhl für Technische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

K. Kähler, M.C. Holz, M. Rohe, J. Strunk, M. Muhler, *ChemPhysChem* **11** (2010) 2521-2529.
Probing the reactivity of ZnO and Au/ZnO nanoparticles by methanol adsorption: A TPD and DRIFTS study

Durch die Anwendung der temperaturprogrammierten Desorption (TPD) und der Diffusen-Reflexions-FTIR-Spektroskopie (DRIFTS) unter kontinuierlichen Flussbedingungen ist es gelungen, auf ZnO-Nanoteilchen die Bildung von zwei unterschiedlichen Methoxy-Spezies bei der Adsorption von Methanol nachzuweisen. Für ihre selektive Oxidation wurden Aktivierungsenergien von 109 kJmol^{-1} bzw. 127 kJmol^{-1} erhalten. Die dabei entstehenden Formiat-Spezies konnten anhand ihrer OCO-Valenzschwingungen auf ZnO und Au/ZnO unterschieden werden. Basierend auf Untersuchungen an ZnO-Einkristalloberflächen konnte geschlossen werden, dass die zwei Methoxy-Spezies und die entsprechenden Formiate auf der wenig reaktiven unpolaren ZnO(10-10)-Oberfläche und der hochaktiven polaren ZnO(000-1)-Oberfläche entstehen. Die Anwesenheit von Gold-Nanoteilchen verstärkt die Bildung von Sauerstofffehlstellen auf der ZnO-Oberfläche. Diese Arbeit ist ein Beitrag zur Überbrückung der sogenannten Materiallücke zwischen Grundlagenuntersuchungen an Einkristallen und angewandter Forschung an realen Katalysatoren.



TEM images of Au/ZnO: 0.9 wt% Au (a,c) and 1.9 wt% Au (b,d) before (a,b) and after treatment at 723 K in 10 % O₂/He (c,d)

Two methoxy species formed during methanol adsorption on ZnO nanoparticles were distinguished by application of temperature-programmed desorption (TPD) and diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy (DRIFTS) under continuous flow conditions. Activation energies of 109 kJmol^{-1} and 127 kJmol^{-1} for their selective oxidation are derived. Correspondingly, the methoxy decomposition results in two distinguishable formate species, which are identified by the OCO stretching vibrations on pure ZnO and Au/ZnO. Based on data obtained on various ZnO single crystal surfaces, the two methoxy and the corresponding formate species are identified to be adsorbed on the exposed less reactive non-polar ZnO(10-10) surface and on the highly reactive polar ZnO(000-1) surface. The presence of the Au nanoparticles results in an enhanced reducibility of ZnO facilitating the generation of oxygen vacancies. This work contributes to bridging the material gap between fundamental research on single crystals and applied research on real catalysts.

Wolfgang Grünert

Technische Chemie – Struktur/Aktivität heterogener Katalysatoren

Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

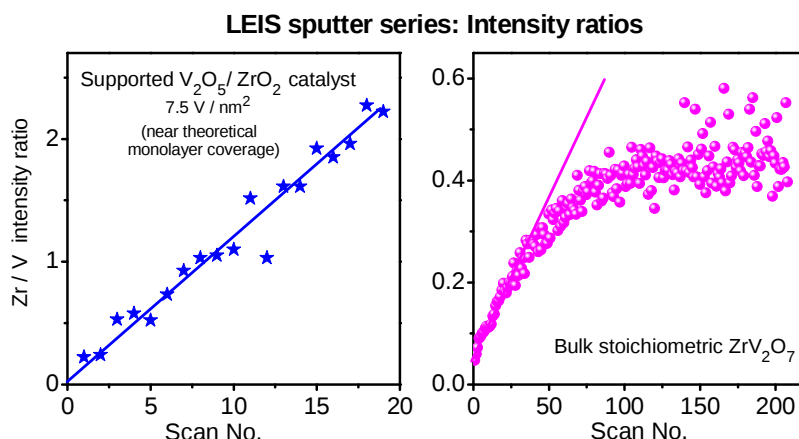
Tel.: +49-(0)234-3222088; FAX: +49-(0)234-3214115

email: wolfgang.gruenert@techem.rub.de

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

S. V. Merzlikin, N. N. Tolkachev, L. E. Briand, T. Strunskus, C. Wöll, I. E. Wachs, W. Grünert, *Angew. Chemie Intern. Ed.* **49** (2010) 8037-8041. Anomalous surface compositions of stoichiometric mixed oxide compounds

Während Oberflächenrekonstruktionen bei metallischen Legierungen seit langem bekannt sind, gehen theoretische Vorstellungen über die Katalyse an stöchiometrischen Mischoxidverbindungen häufig noch davon aus, dass deren Oberflächen als Schnitte entlang von Netzebenen der Volumenstruktur aufgefasst werden können. In Untersuchungen zahlreicher stöchiometrischer Vanadate und Molybdate durch Streuung niederenergetischer Ionen (LEIS) und einer tiefendifferenzierenden, synchrotrongestützten Version von XPS konnte nachgewiesen werden, dass die Oberflächen der stöchiometrischen Verbindungen in vielen Fällen schon im kalzinierten Zustand stark mit Vanadat-(Molybdät-)Oberflächenspezies angereichert sind. Die Dicke der Anreicherungsschicht liegt in der Größenordnung einer Monolage. Die Oberflächen ähneln daher denen von Oxid-Trägerkatalysatoren, wobei die Volumen-Mischphasen die Rolle des Trägers für die segregierten Vanadat-(Molybdät-) Spezies übernehmen.



Although surface reconstruction is a well-known phenomenon with metal alloy phases, the discussion on catalysis with stoichiometric mixed oxide phases is dominated by models in which the surface structures are derived by truncation of the bulk structure along the corresponding lattice planes. In our studies of stoichiometric mixed vanadates and molybdates by Low-energy Ion Scattering (LEIS) and a depth-differentiating, synchrotron-based version of XPS, we found the surfaces of the stoichiometric compounds often strongly enriched with surface vanadium (molybdenum) oxide species already in the calcined state. The thickness of the enrichment zone is on the order of a monolayer. The surfaces are therefore reminiscent of those of supported oxide catalysts, with the bulk mixed phases supporting the segregated vanadium (molybdenum) oxide species.

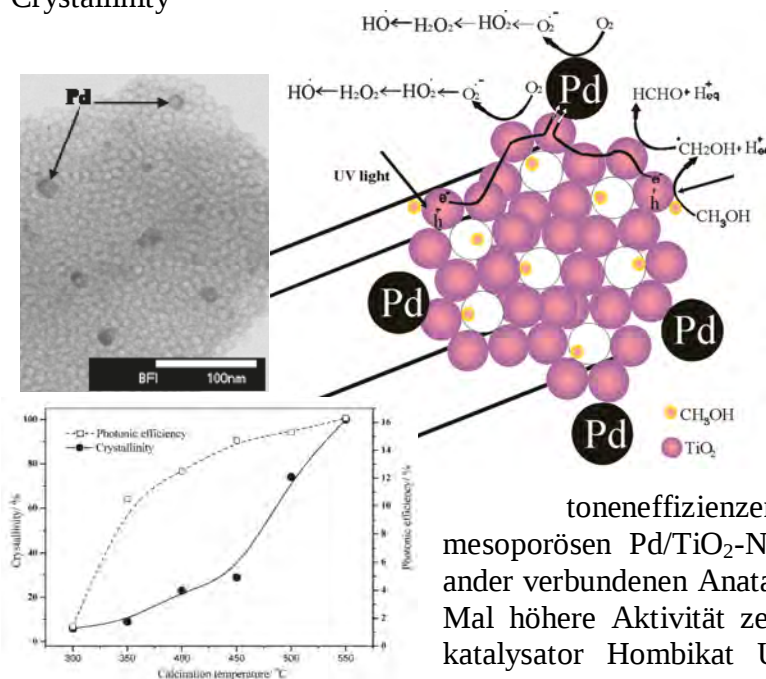
Michael Wark

Technische Chem. – Heterogene Photokatalyse; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3228328; FAX: ++49-(0)234-14115

email: michael.wark@techchem.rub.de; <http://www.techchem.ruhr-uni-bochum.de>

A.A. Ismail, D.W. Bahnemann, L. Robben, V. Yarovyi, M. Wark, *Chem. Mater.* **22** (2010), 108-116. Palladium Doped Porous Titania Photocatalysts: Impact of Mesoporous Order and Crystallinity



Pd/TiO₂-Nanoarchitekturen mit hexagonal hochgeordneten Mesoporen (5-10 nm) wurden in einem Sol-Gel-Prozess unter Verwendung des Block-Co-Polymers F127 als Templat und Kalzination bei verschiedenen Temperaturen aufgebaut. Die Proben wurden in der photokatalytischen Oxidation von CH₃OH zu HCHO getestet.

Durch Bestimmung von Photoneffizienzen konnte gezeigt werden, dass die mesoporösen Pd/TiO₂-Nanoarchitekturen, die aus miteinander verbundenen Anatase-Nanopartikeln bestehen, eine 2.5 Mal höhere Aktivität zeigen als der kommerzielle Photokatalysator Hombikat UV-100, auf den mittels Photoabscheidung Pd-Partikel aufgebracht wurden. In den im Sol-

Gel-Verfahren hergestellten Pd/TiO₂-Hybridmaterialien sind die Pd-Nanopartikel ca. 20 nm groß und ziehen als Antennen die photogenerierten Elektronen an, wodurch die Ladungsträger-Rekombination verringert wird. Die photokatalytischen Oxidationsraten sind vergleichbar, unabhängig davon, ob hexagonal hochgeordnete TiO₂-Netzwerke (nach Kalzination bei 350 °C), Katalysatoren mit zufällig verteilten mesoporösen Kanälen (450 °C) oder nach Heizen auf 550 °C stark ungeordnete Strukturen eingesetzt werden, obwohl die Kristallinität der TiO₂-Nanopartikel erst oberhalb von Temperaturen von 500 °C hohe Werte erreicht. Dieses zeigt, dass hochgeordnete große innere Oberflächen eine mangelnde Kristallinität des TiO₂ bezüglich der photokatalytischen Eigenschaften kompensieren können.

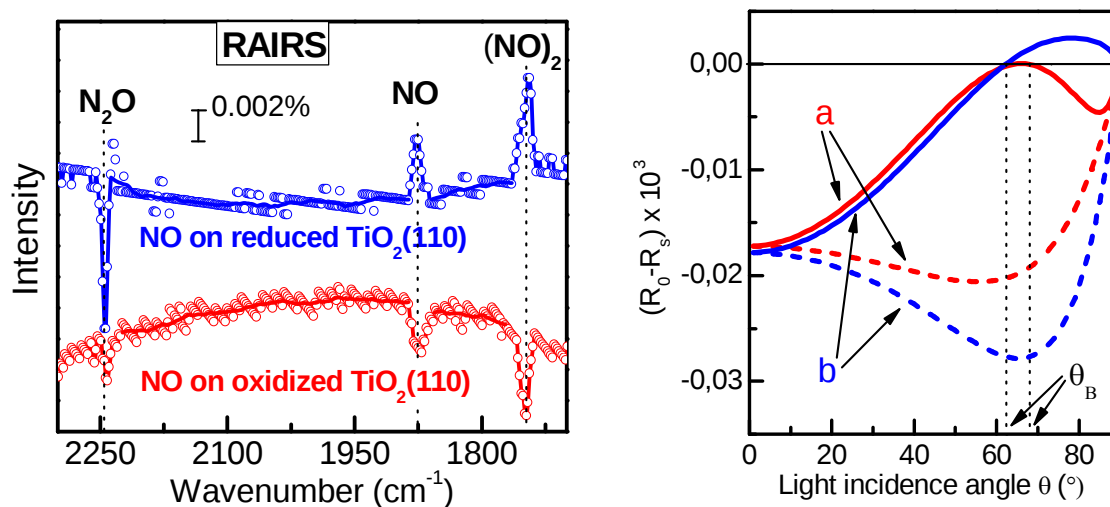
Highly ordered hexagonal mesoporous Pd/TiO₂ nanoarchitectures were obtained in a sol-gel process using the F127 triblock copolymer as a template and calcination at different temperatures. The samples were tested in the photocatalytic oxidation of CH₃OH to HCHO. By determining the photonic efficiencies it was revealed that the hexagonal mesoporous Pd/TiO₂ nanoarchitectures, consisting of aligned anatase nanoparticles, exhibit a 2.5 times higher activity than the commercial photocatalyst Hombikat UV-100, onto which Pd particles were photodeposited. In the sol-gel fabricated Pd/TiO₂ hybrids the Pd nanoparticles exhibit sizes of about 20 nm and act as antennas for the photogenerated electrons, thus reducing charge carrier recombination. The photocatalytic oxidation rates are comparable using either highly ordered hexagonal networks in samples calcined at 350 °C, catalysts with randomly ordered mesoporous channels after calcination at 450 °C or disordered mesostructures prepared at 550 °C, although the crystallinity of the TiO₂ nanoparticles increased strongly only with temperatures exceeding 500 °C. Thus, high and ordered surface areas can compensate lacking crystallinity in the photocatalytic properties of TiO₂.

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>

M. Xu, Y. K. Gao, Y. Wang, Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** (2010) 3649. Monitoring electronic structure changes of TiO₂(110) via sign reversal of adsorbate vibrational bands.

Es wurde die Adsorption von NO auf Rutil TiO₂(110)-Oberflächen bei 100 K und die anschließende Bildung von N₂O über NO-Dimer als Zwischenprodukte durch Reflektions-Absorptions-Infrarotspektroskopie (RAIRS) mit Hilfe von einem Ultrahochvakuum (UHV)-FTIR-System untersucht. Die Analyse der IR-Daten zeigt, dass das Auftreten der mit s-polarisiertem Licht angeregten Schwingungsbanden von Adsorbaten immer zu einer Vergrößerung der Reflektivität (negative Absorptionsbanden) führt, während für p-polarisiertes Licht die Banden entweder positiv oder negativ sein können, abhängig von der Reduktionszustand des Substrats. Dieser Vorzeichenwechsel der optischen Banden wird durch Sauerstoff-Fehlstellendotierung verursacht, die auch die elektronischen und optischen Eigenschaften oxidischer Substrate beeinflusst.



The adsorption of NO on single crystalline rutile TiO₂(110) surfaces at 100 K and the subsequent formation of N₂O via NO dimer intermediates was studied by reflection-absorption infrared spectroscopy (RAIRS) using an ultrahigh vacuum (UHV)-FTIR system. Analysis of the IR data reveals that the occurrence of s-polarized adsorbate vibrational bands always increases the reflectivity, giving negative bands, whereas p-polarized bands are either positive or negative, depending on the reduction state of the substrate. This sign reversal of optical bands is caused by oxygen vacancy doping, which also affects the electronic and optical properties of oxide substrates.

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, M. Hollmann, *Science Signaling* **3** (136) (2010) pe28 (5 pp.) Bridging the synaptic cleft: Lessons from orphan glutamate receptors.

Bei der Kommunikation neuronaler Zellen müssen die zu übertragenden Signale die Distanz zwischen den signalisierenden Zellen an den Kontaktstellen dieser Zellen überwinden. An den wichtigsten Zell-Zell-Kontaktstellen im Zentralnervensystem, den chemischen Synapsen, beträgt der Abstand zwischen den signalisierenden Zellen ungefähr 20 nm. Um diese Distanz zu überwinden, sezerniert die präsynaptische signalisierende Zelle einen diffusiblen Neurotransmitter, der von Rezeptoren der postsynaptischen Zelle detektiert wird. Während dieser klassische Mechanismus der Neurotransmission seit langem bekannt ist, ist immer noch ungeklärt, wie Synapsen strukturell aufrechterhalten werden, wenn sie nicht benutzt werden. Neueste Untersuchungen geben nun erste Einblicke, wie die Natur dieses Problem zumindest bei einer bestimmten Synapse im Kleinhirn gelöst hat: der unerwartete Befund ist, dass drei schon lange bekannte Proteine in überraschender Weise interagieren, um den synaptischen Spalt nicht nur kurzfristig zu überbrücken, sondern eine dauerhafte Assoziation der präsynaptischen mit der postsynaptischen



Seite auszubilden. Dabei fungiert GluD2, ein ionotroper Glutamaterezeptor der delta-Rezeptor-Unterfamilie als postsynaptischer Anker, der indirekt über einen präsynaptisch produziertes lösliches Protein aus der C1q-Familie, das Cerebellin 1, mit dem präsynaptischen Ankerprotein Neurexin einen trimeren Komplex bildet. Es ist die Interaktion dieses Protein-Trios, das die kommunizierenden prä- und postsynaptischen Membranbereiche korrekt aligniert.

For neurons to communicate, signals must cross the cell-to-cell distance at their points of contact. At the predominant cell-cell contact in the central nervous system, the chemical synapse, the synaptic cleft spans roughly 20 nanometers. To signal across

this distance, the presynaptic neuron secretes a diffusible neurotransmitter, which is detected by receptors on the postsynaptic neuron. Although this signaling mechanism has become common knowledge, it remains unclear how synapses are maintained when they are not in immediate use. New evidence reveals how Nature solved this problem at a particular type of synapse in the cerebellum: Three old acquaintances bridge the cleft. The ionotropic glutamate receptor GluD2 constitutes the postsynaptic anchor that indirectly interacts with the presynaptic anchor neurexin through a presynaptically secreted soluble factor, a member of the C1q protein family named Cbln1. This trio collaborates to align pre- and postsynaptic sides.

Guiscard Friedrich Aldous Seeböhm

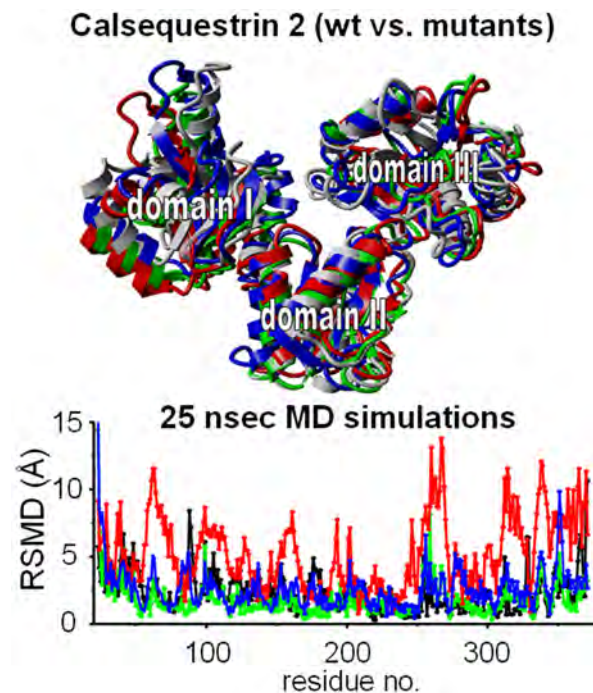
AG Kationenkanäle; Biochemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: guiscard.seeböhm@rub.de;

<http://www.rd.ruhr-uni-bochum.de/neuro/wiss/pi/seeböhm.html>

K. Eckey, N. Strutz-Seeböhm, G. Katz, U. Henrion, G. Fuhrmann, L. Pott, W.A. Linke, M. Arad, F. Lang ; G. Seeböhm, *Cell. Physiol. Biochem.* **26** (2010) 503-12. Modulation of human Ether A Gogo Related Channels by CASQ2 contributes to Etiology of Catecholaminergic Polymorphic Ventricular Tachycardia (CPVT)



Die Länge und Form humanen ventrikulären Aktionspotenzials wird durch ein ausbalanciertes Gleichgewicht von Ca^{2+} -Einstrom und K^{+} -Austrom bestimmt. Unter β -adrenerger Stimulation werden beide Ionenleitfähigkeiten stimuliert, um eine erhöhte Leistung unter Stressbedingungen zu gewährleisten. Intrazelluläres Ca^{2+} wird durch Bindung an Calsequestrin2 (CASQ2) gepuffert. Bestimmte CASQ2-Genvarianten assoziieren mit potenziell tödlichen Arrhythmien. In dieser Studie zeigen wir zum ersten Mal, dass CASQ2 kardiale hERG-Kanäle moduliert und diese Modulation bei den Genvarianten verändert ist. Die Modulation scheint durch veränderte Ca^{2+} -Bindendeeigenschaften der Genvarianten bewirkt zu werden. Molekulare Dynamiksimulationen deuten auf Veränderungen im CASQ2 hin, welche mit den funktionellen

CASQ2-Eigenschaften korrelieren. Unsere *in vitro* und *in silico* Daten deuten auf eine neue Rolle von CASQ2 für die zytosolische Ca^{2+} -Pufferung und Regulation von kardialen hERG-Kanälen hin, welche vermutlich zu der Etiologie Stress-induzierter Arrhythmien beiträgt.

The plateau phase of the ventricular action potential is the result of balanced Ca^{2+} influx and K^{+} efflux. Under β -adrenergic stimulation, both the Ca^{2+} -influx and the delayed rectifier K^{+} currents I_K are stimulated to adjust the cardiac action potential duration to the enhanced heart rate and to ascertain adequate increase in net Ca^{2+} influx. Intracellularly, Calsequestrin2 (CASQ2) serves as the most effective Ca^{2+} reservoir/release system to aid the control of intracellular Ca^{2+} levels. The goal of this study is to test if CASQ2 determines intracellular free Ca^{2+} concentrations and to identify cardiac ion channels that are affected by it. Further, we aim to study disease-associated CASQ2 gene variants in this context. As a result, CASQ2 wild type and CASQ2-mutants modulated hERG functions differently. Free Ca^{2+} measurements and molecular dynamics simulations imply alterations in Ca^{2+} buffer capacity paralleled by changes in the dynamic behavior of the CASQ2-mutants compared to CASQ2 wild type. These *in vitro* and *in silico* data suggest a regulatory role of CASQ2 on cytosolic Ca^{2+} and hERG channels which may contribute to the etiology of stress-induced cardiac arrhythmias.

Rolf Heumann

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

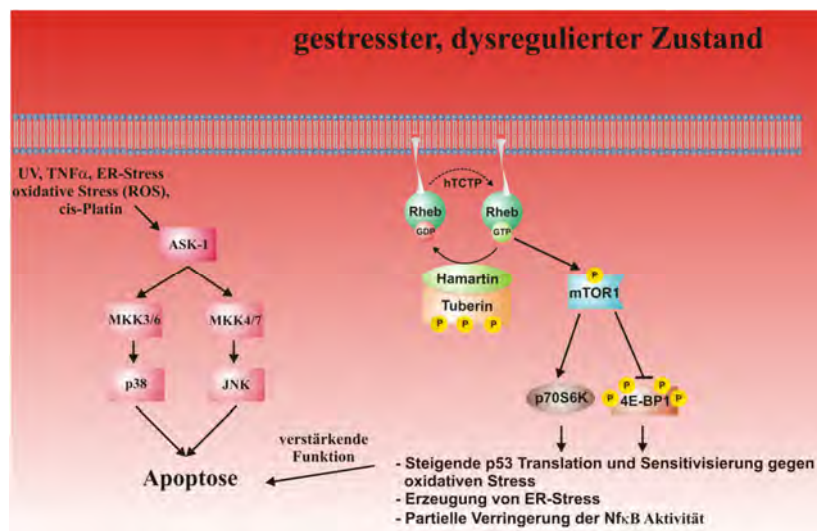
Tel.: ++49-(0)234-3228230; FAX: ++49-(0)234-3214105

email: rolf.heumann@rub.de;

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

S. Karassek, C. Berghaus, M. Schwarten, C.G. Goemans, N. Ohse, G. Kock, K. Jockers, S. Neumann, S. Gottfried, C. Herrmann, R. Heumann, and R. Stoll, *J. Biol. Chem.* **285** (2010) 33979–33991. Ras homolog enriched in brain (Rheb) enhances apoptotic signaling.

In einer langjährigen Zusammenarbeit zwischen der molekular-zellbiologisch arbeitenden Gruppe um R. Heumann und der NMR-Spektroskopie Gruppe um R. Stoll geht es um die Untersuchung der Funktion eines Proteins mit Homologie zum universellen Signalprotein Ras. Dieses Ras-homologe Protein, abgekürzt *Rheb* (*Ras homologue enriched in brain*), wurde auf Ähnlichkeiten oder Unterschiede zu Ras bezüglich seiner Signalkaskade und molekularen Eigenschaften untersucht. Beide Proteine, Ras und Rheb, stimulieren zelluläre Wachstumsprozesse. Werden jedoch Zellen durch UV-Strahlen oder durch pharmakologischen Stress geschädigt, so treten dramatische Unterschiede auf: Ras schützt vor Degeneration, während Rheb die Apoptose, den gesteuerten Zelltod, fördert. Wir konnten dies auf eine -im Vergleich zu Ras- dramatisch verringerte Affinität des Rheb zum Raf-Protein bei gleichzeitiger Aktivierung einer Kinase (mTOR) zurückführen. MTOR wird durch das in der Klinik vielfach eingesetzte Antibiotikum Rapamycin inhibiert. Der durch Rheb verstärkte



Zelltod erfolgte hauptsächlich durch Aktivierung der für die Apoptose signalisierende Kinase (ASK-1). Zusammengefasst hat Rheb, in Abhängigkeit vom Stresszustand der Zelle, eine doppelgesichtige Funktion: Förderung des Zellwachstums oder der Apoptose. Dies sollte beim klinischen Einsatz von Rapamycin berücksichtigt werden.

This work is part of a semi-nal collaboration between the group working on molecular signaling group (R.Heumann) and the NMR-spectroscopy (R.Stoll) group. Here we compare the similarities and dissimilarities in signaling and molecular structure between the proto-oncogene Ras and Rheb which is a homologue of Ras GTPase. Rheb is regulating cell growth, proliferation and regeneration via mammalian target of rapamycin (mTOR). Overexpression of Rheb enhanced the apoptotic effects induced by UV-light, tumour necrosis factor α (TNF α) or tunicamycin in a mTOR complex 1 (mTORC1)-dependent way. The affinity of Rheb to Raf-kinase is 1000-fold lower than that of Ras suggesting a lack of functional interaction. Suppression of a kinase involved in aptosis signaling (ASK-1) strongly reduced the stress induced cell death. In conclusion, activation of Rheb-mTOR not only promotes normal cell growth but also enhances apoptosis in response to diverse toxic stimuli by an ASK-1-mediated mechanism. Pharmacological inhibition of the Rheb/mTORC1 pathway using rapamycin should therefore consider the specific type of the cellular stress stimulus. This may have implications for using rapamycin in clinical settings.

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>

P. Happel, K. Möller, R. Kunz, I. D. Dietzel, *BMC Bioinformatics* **11** (2010) 323: A boundary delimitation algorithm to approximate cell soma volumes of bipolar cells from topographical data obtained by scanning probe microscopy

Die präzise Untersuchung von Zellvolumenänderung durch Wasserflüsse ist aufwendig. Daher wird das Zellsoma oft durch die lichtmikroskopische Bestimmung von Somadurchmessern im Phasenkontrastmikroskop approximiert. Wie fehlerbehaftet dieses Verfahren ist, zeigt die hier reproduzierte Abb. 12 von Happel et al., 2010, in der eine migrierende Oligodendrozyten- Vorläuferzelle zweimal mit Hilfe der Ionenleitfähigkeits-Rastermikroskopie (SICM) abgetastet wurde (**Aa** und **Ab**). Die Analyse der Änderungen der Zellgeometrie im Verlauf von 11 Minuten zeigt, dass trotz konstanter Grundfläche (**E**), das Zellvolumen auf Grund einer Zunahme der Zellhöhe zwischen Scans 1 und 2 zunimmt (**D**, **F**).

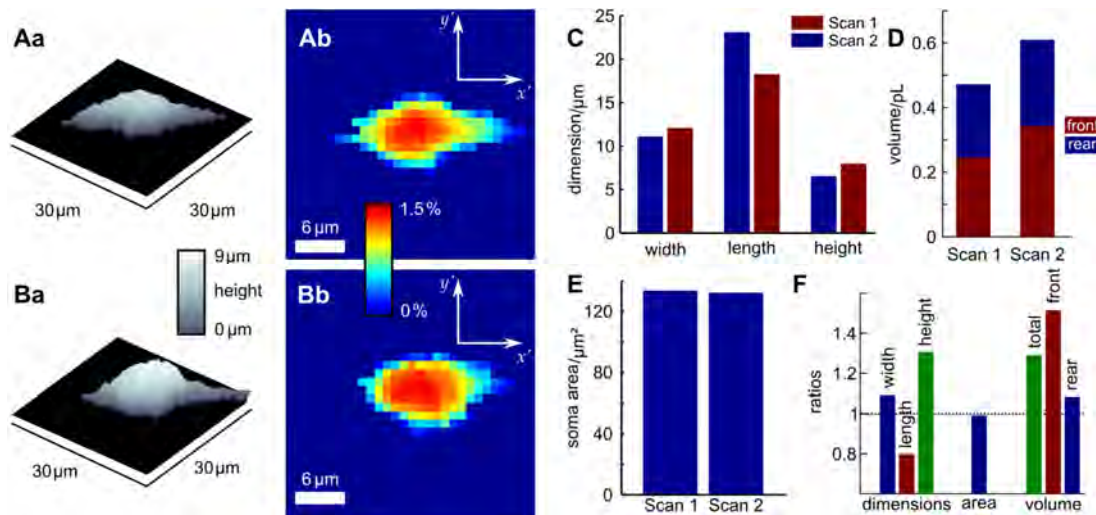


Figure: Soma volume changes of a migrating oligodendrocyte precursor cell. **A** and **B**: three dimensional representations of successive SICM scans of the same cell at a time interval of 11 min and the corresponding boundary delimitation approximations of the cell soma. Color bars indicate height and the contribution to the entire soma volume per pixel, respectively. **C**: corresponding widths, lengths and heights of the cell soma. Note the decrease in length and increase in height. **D**: soma volumes, subdivided into frontal and rear part with respect to the direction of migration, defining the frontal part with respect to the position of the nucleus (approximated by the centroid of the plane of 90% maximal height of the cell). Note the swelling of about 140 pL of soma cell volume. **E**: size of the area covered by the cell soma. Note, that in contrast to the cell soma volume, the basal area covered by the soma even slightly decreased. **F**: ratios of the geometrical parameters determined illustrating the considerable changes in cell shape that occurred between the two scans.

The precise determination of cell soma volume changes in response to water fluxes across its plasma membrane requires cumbersome procedures. Hence the soma volume is often approximated from the basal cell diameter determined in phase contrast optics. Fig. 12 from Happel et al, 2010, reproduced here, demonstrates the errors inherent in this procedure using the example of a migrating oligodendrocyte precursor cell scanned twice with scanning ion conductance microscopy (SICM) at a time interval of 11 minutes (**Aa**, **Ba**). The analysis of the scanned coordinates shows that, in spite of an almost constant basal area of the cell (**E**), the volume increases between the two scans due to an increase in cell height (**D**, **F**).

Raphael Stoll

Biochemie II, Biomolekulare NMR-Spektroskopie;

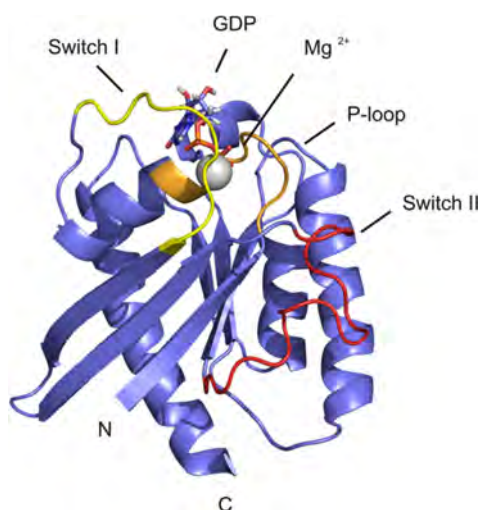
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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. Karassek, C. Berghaus, M. Schwarten, C.G. Goemans, N. Ohse, G. Kock, K. Jockers, S. Neumann, S. Gottfried, C. Herrmann, R. Heumann, R. Stoll, *J. Biol. Chem.* **44** (2010), 33979-33991. Ras Homolog Enriched in Brain (Rheb) Enhances Apoptotic Signaling.

Um die strukturellen Grundlagen der physiologischen Funktion des Rheb zu untersuchen, wurde die Struktur des Rheb in Lösung mittels mehrdimensionaler NMR-Spektroskopie bestimmt (Fig. 1). Dabei zeigte sich, dass das Rheb die für kleine GTPasen typische Faltungstopologie besitzt. Darüber hinaus besitzen die so genannten „switch I“- und „switch II“-Regionen ein dem Ras vergleichbares dynamisches Verhalten auf der Pico- bis Nanosekundenzeitskala, welches abhängig ist vom jeweils gebundenem Nukleotid - GppNHp oder GDP. Mittels NMR-basierter Bindungsstudien wurde zudem gefunden, dass aktiviertes, d. h. GppNHp-gebundenes, Rheb an die c-Raf-Ras-Bindungsdomäne (RBD) bindet. Allerdings ist die Affinität der RBD zu Rheb circa eintausendmal geringer als zu Ras. Daraus kann gefolgert werden, dass die Interaktion zwischen Rheb und der c-Ras-RBD keine physiologische Relevanz besitzt.



Rheb is a homolog of Ras GTPase that regulates cell growth, proliferation, and regeneration via mammalian target of rapamycin (mTOR). We found that overexpression of lipid-anchored Rheb enhanced the apoptotic effects induced by UV light, TNF α , or tunicamycin in an mTOR complex 1 (mTORC1)-dependent manner. To gain structural insight into the signaling mechanisms, we determined the structure of Rheb-GDP by NMR spectroscopy (Fig. 1). The complex adopts the typical canonical fold of Ras GTPases and displays the characteristic GDP-dependent picosecond to nanosecond backbone dynamics of the switch I and switch II regions. NMR spectroscopy revealed Ras effector-like binding of activated Rheb to the c-Raf-Ras-binding domain (RBD), but the affinity was 1000-fold lower than the Ras/RBD interaction, suggesting a lack of functional interaction. In conclusion, Rheb-mTOR activation not only promotes normal cell growth but also enhances apoptosis in response to diverse toxic stimuli via an ASK-1-mediated mechanism. Pharmacological regulation of the Rheb/mTORC1 pathway using rapamycin should take the presence of cellular stress into consideration, as this may have clinical implications.

Bernhard Hovemann

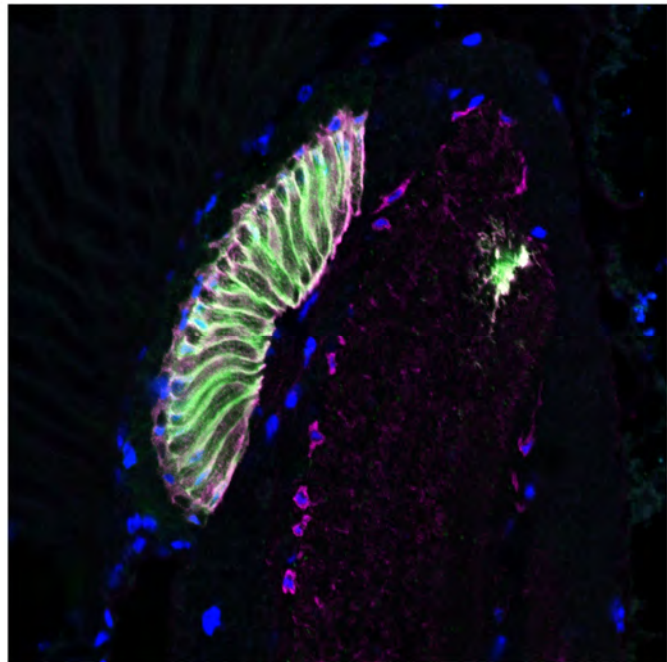
BiochemieII - AG Molekulare Zellbiochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: bernhard.hovemann@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ag-hovemann>

A. Ziegler and B.T. Hovemann: *Drosophila* aspartate decarboxylase Black is expressed in Glia and interacts with Ebony in histamine inactivation and recycling in vision; in preparation

Die *Drosophila* Mutanten *black* (*b*) und *ebony* (*e*) zeigen korrespondierende Pigmentdefekte in der adulten Kutikula. Sie belegen eine kooperative Aktivität in der β -Alanin-Dopamin Bildung. Ebony konjugiert β -Alanin in der visuellen Signaltransduktion aber an Histamin und bildet β -Alanin-Histamin (Carcinin). Die *ebony* Mutation unterbricht daher die Signaltransduktion und zeigt einen Elektroretinogramm (ERG) Defekt. Im Gegensatz dazu zeigt sich aber kein ERG Phänotyp, wenn die Aspartat Decarboxylase Black mutiert ist. Diese Diskrepanz zeigt einen lange bekannten Widerspruch zur Annahme einer Ebony und Black Interaktion auf. Immunzytochemische Markierungen von Kopf Gefrierschnitten (Bild) und Gehirnpräparaten zeigten Black Expression (grün) in Lamina Glia, in einem neuen Typ von Astrozyten ähnlichen Glia in der Medulla (blaue Markierung) in Glia der Ocellarganglions. In allen diesen Gliatypen war Black grundsätzlich assoziiert mit Ebony Expression (rote Markierung). Deshalb weisen Aktivität, Lokalisierung und Koexpression mit Ebony in hohem Masse auf eine funktionelle Interaktion von Black und Ebony auch in der visuellen Signaltransduktion hin wie sie schon in der Kutikula gefunden worden ist.



Drosophila mutant *black* (*b*) and *ebony* (*e*) reveal corresponding pigmentation defects in the adult cuticle, which disclose their co-operative activity in β -alanin-dopamine formation. Ebony conjugates β -alanine in visual signal transduction to histamine forming β -alanin-histamine, or carcinine. Mutation of *ebony* disrupts signal transduction and reveals an Elektroretinogramm (ERG) phenotype. Contrary, however, to *ebony* there is no ERG phenotype observed when aspartate decarboxylase *black* is disrupted. This discrepancy poses a conundrum to the long-standing assumption of Black and Ebony interaction. Immuno-labeling of head freeze sections (Figure) and brain whole mounts revealed Black expression (green) in lamina glia, in a novel type of astrocyte-like glia in the medulla (blue label), in glia of the ocellar ganglion. In all this glia Black expression was strictly accompanied by Ebony (red label). Therefore, activity, localization and co-expression with Ebony strongly implicate a functional interaction of Black with Ebony in visual signal transduction as observed previously in cuticle.

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, A. Russek, H. Kleinhorst, *Chemkon* **17** (2010) 4, 1-8. KEMIE – Kinder erleben mit ihren Eltern Chemie - Didaktische Konzeption und Umsetzung eines langfristig angelegten Eltern-Kind-Projektes.

Das Projekt **KEMIE** (**K**inder **E**rleben **M**it **I**hren Eltern Chemie) ist ein langfristig angelegtes Eltern-Kind-Projekt, das sich an Kinder ab der 3. bis einschließlich der 6. Jahrgangsstufe und deren Eltern richtet. Dabei stehen die Eltern ihren Kindern als Experimentier- und Lernpartner zur Seite. Die Entwicklung der insgesamt neun Versuchstage, die über einen Zeitraum von Oktober bis Juni stattfinden, basiert auf einem didaktischen Konzept, das die Leitlinien „naturwissenschaftliche Denk- und Arbeitsweisen“, „Stoff-Struktur-Eigenschaften“ und „Alltagsbezug“ einschließt. Als Veranstaltungsort für das KEMIE-Projekt wird ein außerschulischer Lernort, nämlich das Alfred Krupp-Schülerlabor der Ruhr-Universität Bochum, genutzt. In diesem Beitrag werden das didaktische Konzept, die konkrete Umsetzung und die Schwerpunkte eines fachmethodischen Spiralcurriculums vorgestellt sowie erste Ergebnisse zur Annahme des Projekts durch die Teilnehmer präsentiert (siehe Abb.).

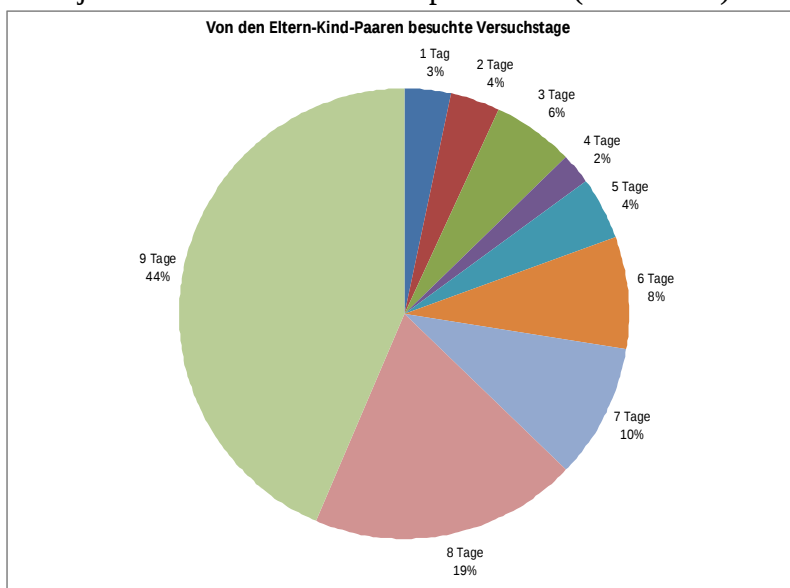
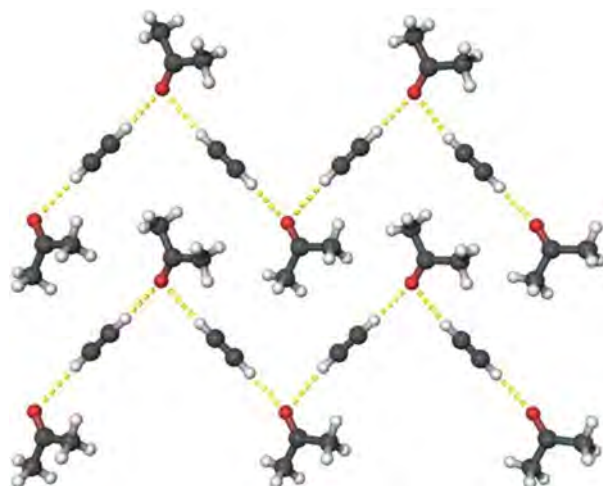


Abbildung: Anzahl der besuchten Versuchstage von Eltern und Kindern (d.h. 3 % aller Eltern-Kind-Paare haben nur an einem Versuchstag teilgenommen, 44 % besuchten alle neun Versuchstage).

KEMIE is a long-term project addressed to children from third to sixth grade and their parents in which the adults act as partners for their children in matters of experimenting and learning. The altogether nine days of experimentation, which span from October to June, are based on a pedagogical conception which consists of three guidelines: scientific methods of thinking and operation, substance-structure-properties and connection to everyday life. The project takes place at an extracurricular location: the Alfred Krupp-Schülerlabor of the Ruhr-University in Bochum. This article presents the pedagogical conception, the realization and focal points of a methodical spiral curriculum as well as first results concerning the participants' acceptance of the project.

FOR 618

Die Aggregation kleiner Moleküle mit präzisen Methoden verstehen – Experiment und Theorie im Wechselspiel



Die Aggregation von Molekülen unter Bildung wohlgeordneter Cluster bis hin zu Molekülkristallen ist ein faszinierendes, im Detail aber immer noch wenig verstandenes Phänomen. Die schwachen intermolekularen Wechselwirkungen, die für die Aggregation verantwortlich sind, lassen sich experimentell und theoretisch nur schwierig untersuchen. So ist die Vorhersage der Strukturen von Molekülkristallen bis heute ein ungelöstes Problem der Chemie, denn dazu müssen die dynamischen Prozesse verstanden werden, die von der Nukleation weniger Moleküle bis zum makroskopischen Kristall führen. An diesem

Punkt möchte die Forschergruppe ansetzen. Ziel ist es, ein detailliertes molekulares Verständnis von Aggregationsphänomenen – von der Bildung von Dimeren über größere Aggregate als „Urzellen“ der Kristallbildung bis zu ausgedehnten Molekülkristallen – zu erhalten. Die Aggregation und Kristallbildung selektierter Systeme soll in allen Details experimentell und theoretisch untersucht werden. Dazu gehört die Bestimmung von Strukturen, Energien und kinetischen Daten auf allen Stufen der Aggregation. Um dieses Ziel zu erreichen werden vorwiegend kleine Moleküle untersucht, bei denen die intermolekularen Wechselwirkungen am besten quantitativ bestimmt werden können. Die experimentellen Techniken umfassen die spektroskopische Charakterisierung von Aggregaten kleiner Moleküle in der Gasphase, in Molekularstrahlen, in suprafluiden, ultrakalten Heliumtröpfchen und in Inertgasmatrizes. Intermolekulare Wechselwirkungen in Molekülkristallen werden mit Hilfe der Tieftemperaturkristallisation und Röntgenstrukturanalyse bestimmt. Theoretische Methoden der Forschergruppe sind die quantitative Berechnung von intermolekularen Wechselwirkungen, Quanten Monte Carlo-Simulationen und die *ab-initio*-Molekulardynamik von Aggregaten. Dieses breite Methodenspektrum mit einer ausgewogenen Beteiligung experimentell und theoretisch arbeitender Arbeitsgruppen erlaubt die Untersuchung der Aggregation in der Gasphase, in Molekularstrahlen, in Matrizes und im Festkörper vom Einzelmolekül bis zu Einkristallen. Der Schwerpunkt liegt dabei bei der quantitativen Bestimmung von Strukturparametern und intermolekularen Wechselwirkungen sowie bei Untersuchungen zur Dynamik von Aggregationsprozessen. Das langfristige Ziel der Forschergruppe ist es, die Aggregatbildung nicht nur zu verstehen, sondern auch auf der Basis von Moleküleigenschaften quantitativ vorauszusagen.

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 2010 über zehn gemeinsame Publikationen veröffentlicht, darunter auch Arbeiten im renommierten *J. Med. Chemistry*. In Bochum sind an der FOR630 die Gruppen Sheldrick (Analytische Chemie) und Metzler-Nolte (Anorg. Chemie I) beteiligt. Dr. Schatzschneider, der eine unabhängige, im Rahmen der FOR630 geförderte Nachwuchsgruppe in Bochum leitet hat im Jahr 2010 einen Ruf auf eine Professur für Anorganische Chemie an die Universität Würzburg angenommen. 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 ten joint papers were published from this Research Unit 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.

Zentrum für Elektrochemie
Center for Electrochemical Sciences (CES)

Analytische Chemie, Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3225464; FAX: ++49-(0)234-3214420
email: ces@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ces>

Sprecher: Prof. Dr. W. Schuhmann (Analytische Chemie)
Prof. Dr. M. Stratmann (Max-Planck-Institut für Eisenforschung,
Düsseldorf)
Wiss. Koordination: PD Dr. Sabine Seisel (Analytische Chemie)

CES wurde Ende 2009 von der Ruhr-Universität Bochum und dem Max-Planck-Institut für Eisenforschung Düsseldorf mit Unterstützung von ThyssenKrupp Steel als ein Projekt des HighTech.NRW-Wettbewerbs gegründet. Mit dem Ziel der Einrichtung eines regionalen Kompetenzzentrums für Elektrochemie wird aufbauend auf der bestehenden Expertise der Mitglieder wird die international konkurrenzfähige Forschung ausgebaut und eine nachhaltige Ausbildung von Nachwuchskräften erfolgen. Im Jahr 2010 wurde die Infrastruktur des Zentrums aufgebaut, die als Basis für aktuelle und zukünftige Forschungsarbeiten notwendig ist. Kern ist ein zentrales Elektrochemie-Labor ausgerüstet mit hochmodernen Elektrochemie-, Mikroskopie-, und Spektroskopietechniken. Für eine umfangreiche Nachwuchsförderung wurden drei Nachwuchsgruppen gegründet, die auf den Gebieten "Molecular Nanostructures" (Dr. Nicolas Plumere), "Semiconductor Electrochemistry" (Dr. Fabio La Mantia) und "Adsorption and Electrocatalysis" (Dr. Aliaksandr Bandarenka) arbeiten. Eine Reihe von Forschungsprojekten zu aktuellen elektrochemischen Fragestellungen wie Li-Ionen-Batterien, Sauerstoff-Reduktion, Biosensoren, Methodenentwicklung sowie theoretischer Elektrochemie wurde initiiert. CES ist Partner im BMBF-Projekt "Kompetenzverbund Nord: Steigerung der Kompetenz in Elektrochemie für die Elektromobilität". Im Rahmen des Projekts wurde ein Rasterkraftmikroskop und ein elektrochemisches Rastermikroskop erstmals in einen Handschuhkasten transferiert, um orts aufgelöste elektrochemische Charakterisierung von luft- und wasserempfindlichen Materialien wie z.B. Lithium durchzuführen.

As one winner of the HighTech.NRW competition CES has been founded in October 2009 by Ruhr-Universität Bochum and Max-Planck-Institut für Eisenforschung Düsseldorf, with financial 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 electrochemistry at the highest standard and the promotion of young researchers. To date the CES has already completed its first successful year, which was mostly coined by building a strong foundation for future research. A central electrochemistry laboratory has been built up with modern electrochemical-, microscopic- and spectroscopic techniques. In addition, three junior research groups working on "Molecular Nanostructures" (Dr. Nicolas Plumere), "Semiconductor Electrochemistry" (Dr. Fabio La Mantia), and "Adsorption and Electrocatalysis" (Dr. Aliaksandr Bandarenka) have been established.

Various research projects have already been initiated related to hot topics like lithium ion batteries, the oxygen reduction reaction, biosensors as well as theoretical electrochemistry. CES is one of the partners of the BMBF-project "Kompetenzverbund Nord: Steigerung der Kompetenz in Elektrochemie für die Elektromobilität". For the characterization of battery materials an atomic force microscope (AFM) and a scanning electrochemical microscope (SECM) have been transferred into a glove box to assure inert working conditions. The adaptation of these techniques to inert conditions is also counted to the focus in instrument development within CES which include the development of space-resolved electrochemical methods or combining electrochemical methods with spectroscopy.

Veröffentlichungen 2010

Anorganische Chemie 1

- G. Jaouen, N. Metzler-Nolte (Editors), *Topics in Organometallic Chemistry*, **Vol. 32** (2010) Springer, Heidelberg, 291 pages Medicinal Organometallic Chemistry
- N. Metzler-Nolte "Biomedical applications of organometal-peptide conjugates", *Chapter 8 in Topics in Organometallic Chemistry*, **Vol. 32** (2010) 195-217. "Medicinal Organometallic Chemistry" (Editors: Gerard Jaouen and Nils Metzler-Nolte) Springer, Heidelberg
- V. Vasylyeva, T. Kedzierski, N. Metzler-Nolte, C. Schauerte, K. Merz *Crystal Growth & Design* **10** (2010) 4224-4226. Polymorphism of Pyridine-N-oxide and Its Deuterated Analogues
- M. Patra, G. Gasser, M. Wenzel, K. Merz, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *Organometallics* **29** (2010) 4312-4319. Synthesis and Biological Evaluation of Ferrocene-containing Bioorganometallics Inspired by the Antibiotic Platensimycin Lead Structure
- G. Gasser, K. Jäger, M. Zenker, R. Bergmann, J. Steinbach, H. Stephan, N. Metzler-Nolte, *J. Inorg. Biochem.* **104** (2010) 1133–1140. Preparation, ^{99m}Tc-Labeling and Biodistribution Studies of a PNA Oligomer Containing a New Ligand Derivative of 2,2'-Dipicolylamine
- B. Fränzel, C. Frese, M. Penkova, N. Metzler-Nolte, J. E. Bandow, D. A. Wolters, *J. Biol. Inorg. Chem.* **15** (2010) 1293-1303. Corynebacterium glutamicum exhibits a membrane related response to a small ferrocene conjugated antimicrobial peptide
- M. Patra, G. Gasser, D. Bobukhov, K. Merz, A. V. Shtemenko, N. Metzler-Nolte, *Dalton Trans.* **39** (2010) 5617-5619. Sequential insertion of three different organometallics into a versatile building block containing a PNA backbone
- N. S. Hüskens, M. Gebala, W. Schuhmann, N. Metzler-Nolte, *ChemBioChem* **11** (2010) 1754-1761. A single-electrode, dual-potential Ferrocene-PNA biosensor for the detection of DNA
- C. Kötting, Y. Suveyzdis, R. S. Bojja, N. Metzler-Nolte, K. Gerwert *Appl. Spectrosc.* **64** (2010) 967-972. Label-Free Screening of Drug-protein Interactions by trFTIR Spectroscopic Assays Exemplified by Ras Interactions
- I. C. Henao Castañeda, C. O. Della Védova, O. E. Piro, N. Metzler-Nolte, J. L. Jios*, *Polyhedron* **29** (2010) 827-832. Synthesis of two new thioesters bearing ferrocene: Vibrational characterization and ab initio calculations. X-ray crystal structure of S-(2-methoxyphenyl)ferrocenecarbothioate
- K. Meister, J. Niesel, U. Schatzschneider, D. A. Schmidt, N. Metzler-Nolte, M. Havenith, *Angew. Chem. Int. Ed.* **49** (2010) 3310-3312. Metal-carbonyl complexes as a new modality for label-free live cell imaging by Raman microspectroscopy
- K. Merz, V. Vasylyeva, *CrystEngComm* **12** (2010) 3989-4002. Development and boundaries in the field of supramolecular synthons
- D. H. Frieze, C. Hättig, M. Rohe, K. Merz, *J. Phys. Chem. C* **114** (2010) 19415-19418. Oxidation of 2-Propanol by Peroxo Titanium Complexes: A Combined Experimental and Theoretical Study.

- V. Vasylyeva, K. Merz, *Crystal Growth & Design* **10** (2010) 4250-4255. Fluorobenzonitriles: Influence of the Substitution Pattern on Melting and Crystallization Properties.
- V. Vasylyeva, K. Merz, *J. Fluorine Chem.* **131** (2010) 446-449. Aggregation of fluorine-substituted pyridines.
- K. Splith, I. Neundorff, W. Hu, H.W. Peindy N'Dongo, V. Vasylyeva, K. Merz, U. Schatzschneider, *Dalton Trans.* **39** (2010) 2536-2545. Influence of the metal complex-to-peptide linker on the synthesis and properties of bioactive $\text{CpMn}(\text{CO})_3$ peptide conjugates.
- K. Richter, A. Birkner, A.-V. Mudring, *Angew. Chem. Int. Ed.* **49** (2010), 2431–2435. Stabilizer-free, long-time stable copper nanoparticles and copper-zinc oxide nanocomposites via physical vapour deposition into ionic liquids.
- N. v. Prondzinski, J. Cybinska, A.-V. Mudring, *Chem. Commun.* **46** (2010), 4393–4395. Easy access to ultra long-time stable, luminescent reduced lanthanide(II) fluoride nanoparticles in ionic liquids.
- E. Boroqqs, M. J. Earle, M.A. Gilea, Al J. Robertson, K.R. Seddon, A. Tomaszowska, J. Vyle, F. Rieger, L. Trusov, A.-V. Mudring, *Chem. Commun.* **46** (2010), 716–718. On the dissolution of non-metallic elements (S, Se, Te and P) in ionic liquids.
- C. Lorbeer, J. Cybinska, A.-V. Mudring, *Chem. Commun.* **63** (2010), 571–573. Facile preparation of quantum cutting $\text{GdF}_3\text{:Eu}^{3+}$ nanoparticles from ionic liquids.
- A. Babai, S. Pitula, A.-V. Mudring, *Eur. J. Inorg. Chem.* **31** (2010), 4993–4937. Ligand Exchange in Ionic Liquids.
- K. Habermehr, A.-V. Mudring, G. Meyer, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2010), 4075–4078. Last of the Five: the Elusive "Tantalum(III) Bromide", a Perovskite-Related Salt, $[\{\text{Ta}_6\}\text{Br}_{12}]\text{Br}_3[\text{TaBr}_6]_{0.86}$.
- S. Zimmermann, M. Brühmann, F. Casper, C. Felser, O. Heyer, T. Lorenz, A.-V. Mudring, G. Meyer, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2010), 2613–2619. Eight-Coordinate Endohedral Rhenium, Osmium and Iridium Atoms in Rare-Earth Halide Cluster Complexes.
- A.-V. Mudring, S.F. Tang, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2010), 2569–2581. Ionic Liquids for Lanthanide and Actinide Chemistry.
- A. Getsis, A.-V. Mudring, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2010), 2172–2177. A Luminescent Ionic Liquid Crystal: $[\text{C}_{12}\text{mim}]_4[\text{EuBr}_6]\text{Br}$.
- S. Pitula, A.-V. Mudring, *Chem. Eur. J.* **16** (2010), 3355–3365. Manganate(II) based Ionic Liquids: Synthesis and Optical Properties.
- M. Grodzicki, B. Mallick, A.-V. Mudring, *J. Physics: Conference Series* (2010) 200. Electronic and magnetic structure of $(\text{CrCl}_3)_3$.
- T. Alammar, A. Birkner, O. Shekhah, A.-V. Mudring, *Mat. Chem. Phys.* **120** (2010), 109–113. Sonochemical Preparation of TiO_2 Nanoparticles in the Ionic Liquid 1-(3-Hydroxypropyl)-3-methylimidazolium-bis(trifluoromethylsulfonyl)amide.
- J. Bartosik, A.-V. Mudring, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** (2010), 4005–4011. $[\text{Ni}(\text{tmen})(\text{acac})][\text{B}(\text{Ph})_4]$ a probe for the anion basicity of ionic liquids.
- S. Pitula, A.-V. Mudring, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** (2010), 2056–7063. Optical Basicity of ionic Liquids.
- A. Getsis, A.-V. Mudring, *Z. Allg. Anorg. Chem.* **639** (2010), 1726–1734. Lanthanide containing ionic liquid crystals: EuBr_2 , SmBr_3 , TbBr_3 and DyBr_3 in $\text{C}_{12}\text{mimBr}$.

- T. Bäcker, A.-V. Mudring. *Z. Allg. Anorg. Chem.* **636** (2010), 1002–1005. Sodium trinitratouranylate(VI) Na[UO₂(NO₃)₃].
- A.-V. Mudring. *Aust. J. Chem.* **63** (2010) 544–564. Crystallization of Ionic Liquids: Theory and Techniques.
- N. Herzmann, M. Brühmann, A.-V. Mudring, G. Meyer. *Inorg. Chem.* **49** (2010) 5347–4349. Chains of Face-Sharing {ZPr₆} Octahedra with Alternating Endohedral Iridium Atoms and Chloride Ions in IrPr₆Cl₁₁.
- T. Woike, A. Schuy, J. Krause, D. Schaniel, S. Pitula, A.V. Mudring, *PCT Int. Appl.* (2010), 59pp. CODEN: PIXXD2WO 2010091848. Photostability of solution of fluorescent dyes in ionic liquids in the presence of an electron acceptors.
- T. Woike, A. Schuy, J. Krause, D. Schaniel, S. Pitula, A.V. Mudring, *Ger. Offen.* (2010), 28pp. CODEN: GWXXBX DE 102009000784. Photostability of solution of fluorescent dyes in ionic liquids in the presence of an electron acceptors.
- K. Meister, J. Niesel, U. Schatzschneider, D. Schmidt, N. Metzler-Nolte, M. Havenith-Newen, *Angew. Chem.* **122** (2010) 3382–3384; *Angew. Chem. Int. Ed.* **49** (2010) 3310–3312. Markierungsfreie Visualisierung von löslichen Metallcarbonylkomplexen in lebenden Zellen mithilfe von Raman-Mikrospektroskopie.
- K. Splith, W. Hu, U. Schatzschneider, L.A. Onambele, A. Prokop, R. Gust, I. Ott, I. Neundorff, *Bioconjugate Chem.* **21** (2010) 1288–1296. Protease-activatable organometal-peptide bioconjugates with enhanced cytotoxicity on cancer cells.
- U. Schatzschneider, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2010) 1451–1467. Photoactivated biological activity of transition metal complexes.
- U. Schatzschneider, *Nachrichten aus der Chemie* **58** (2010) 249–253. Trendbericht Bioanorganische Chemie 2009.
- M. Seitz, N. Alzakhem, *J. Chem. Inf. Model.* **50** (2010) 217–220. Computational Estimation of Lanthanoid-Water Bond Lengths by Semiempirical Methods
- E.G. Moore, J. Xu, S. Dodani, C.J. Jocher, A. D'Aleo, M. Seitz, K.N. Raymond, *Inorg. Chem.* **49** (2010) 4156–4166. 3,2-HOPO Complexes of Near Infra-Red (NIR) Emitting Lanthanides: Efficient Sensitization of Yb(III) and Nd(III) in Aqueous Solution
- C. Bischof, J. Wahsner, J. Scholten, S. Trosien, M. Seitz, *J. Am. Chem. Soc.* **132** (2010) 14334–14335. Quantification of C-H Quenching in Near-IR Luminescent Ytterbium and Neodymium Cryptates

Anorganische Chemie 2

- D. Barreca, D. Bekermann, E. Comini, A. Devi, R. A. Fischer, A. Gasparotto, C. Maccato, C. Sada, G. Sberveglieri, E. Tondello, *CrystEngComm* **12** (2010) 3419–3421. Urchin-like ZnO nanorod arrays for gas sensing applications
- D. Barreca, D. Bekermann, E. Comini, A. Devi, R. A. Fischer, A. Gasparotto, C. Maccato, G. Sberveglieri, E. Tondello *Sens. Actuators, B*, **B149**, (2010) 1–7. 1D ZnO nano-assemblies by plasma-CVD as chemical sensors for flammable and toxic gases
- D. Barreca, D. Bekermann, A. Devi, R. A. Fischer, A. Gasparotto, C. Maccato, E. Tondello, M. Rossi, S. Orlanducci, M. L. Terranova, *Chem. Phys. Lett* **500**, (2010) 287–290. Novel insight into the alignment and structural ordering of supported ZnO nanorods

- M. Becker, R. N. d'Alnoncourt, K. Kaehler, J. Sekulic, R. A. Fischer, M. Muhler, *Chem. Vap. Deposition* **16** (2010) 85-92. The synthesis of highly loaded Cu/Al₂O₃ and Cu/ZnO/Al₂O₃ catalysts by the two-step CVD of CuIIdiethylamino-2-propoxide in a fluidized-bed reactor
- D. Bekermann, A. Gasparotto, D. Barreca, L. Bovo, A. Devi, R. A. Fischer, O. I. Lebedev, C. Maccato, E. Tondello, T. G. Van, *Des Cryst. Growth* **10**, (2010) 2011-2018. Highly Oriented ZnO Nanorod Arrays by a Novel Plasma Chemical Vapor Deposition Process,
- D. Bekermann, A. Gasparotto, D. Barreca, A. Devi, R. A. Fischer, M. Kete, S. U. Lavrencic, O. I. Lebedev, C. Maccato, E. Tondello, T. G. Van, *ChemPhysChem* **11** (2010) 2337-2340. ZnO Nanorod Arrays by Plasma-Enhanced CVD for Light-Activated Functional Applications
- D. Bekermann, D. Rogalla, H.-W. Becker, M. Winter, R. A. Fischer, A. Devi, *Eur. J. Inorg. Chem* (2010) 1366-1372. Volatile, Monomeric, and Fluorine-Free Precursors for the Metal Organic Chemical Vapor Deposition of Zinc Oxide
- A. Betard, D. Zacher, R. A. Fischer, *CrystEngComm*. **2010**, *12*, 3768-3772. Dense and homogeneous coatings of CPO-27-M type metal-organic frameworks on alumina substrates
- M. Cokoja, H. Parala, A. Birkner, R. A. Fischer, O. Margeat, D. Ciuculescu, C. Amiens, B. Chaudret, A. Falqui, P. Lecante, *Eur. J. Inorg. Chem* (2010) 1599-1603. Organometallic Synthesis of β -CoAl Nanoparticles and β -CoAl/Al Nanoparticles and Their Behaviour upon Air Exposure
- S. Cwik, A. P. Milanov, V. Gwildies, T. B. Thiede, V. S. Vidyarthi, A. Savan, R. Meyer, H.-W. Becker, D. Rogalla, A. Ludwig, R. A. Fischer, A. Devi, *ECS Trans.* **28** (2010) 159-165. Engineered tungsten oxy-nitride thin film materials for photocatalytical water splitting fabricated by MOCVD
- D. Esken, S. Turner, O. I. Lebedev, T. G. Van, R. A. Fischer, *Chem. Mater* **22** (2010) 6393-6401. Au@ZIFs: Stabilization and Encapsulation of Cavity-Size Matching Gold Clusters inside Functionalized Zeolite Imidazolate Frameworks, ZIFs
- V. Gwildies, T. B. Thiede, S. Amirjalayer, L. Alsamman, A. Devi, R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **49** (2010) 8487-8494. All-Nitrogen Coordinated Amidinato/Imido Complexes of Molybdenum and Tungsten: Syntheses and Characterization
- M. Halbherr, T. Bollermann, C. Gemel, R. A. Fischer, *Angew. Chem., Int. Ed* **49** (2010) 1878-1881. Selective Oxidative Cleavage of Cp* from Coordinated GaCp*: Naked Ga⁺ in [GaNi(GaCp*)₄]⁺ and [(μ_2 -Ga)M₃(GaCp*)₆]ⁿ⁺
- S. Henke, R. Schmid, J.-D. Grunwaldt, R. A. Fischer, *Chem. Eur. J.* **16** (2010) 1429 – 14306. Flexibility and Sorption Selectivity in Rigid Metal-Organic Frameworks: The Impact of Ether-Functionalised Linkers
- M. Meilikhov, K. Yussenko, D. Esken, S. Turner, T. G. Van, R. A. Fischer, *J. Inorg. Eur. Chem* (2010) 3701-3714. Metals@MOFs - Loading MOFs with Metal Nanoparticles for Hybrid Functions
- M. Meilikhov, K. Yussenko, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* **39** (2010) 10990-10999. Incorporation of metallocenes into the channel structured Metal-Organic Frameworks MIL-53(Al) and MIL-47(V)
- M. Meilikhov, K. Yussenko, A. Torrisi, B. Jee, C. Mellot-Draznieks, A. Poepl, R. A. Fischer, *Angew. Chem., Int. Ed* **49** (2010) 6212-6215. Reduction of a Metal-Organic Framework by an Organometallic Complex: magnetic Properties and Structure of the Inclusion Compound [(η_5 -C₅H₅)₂Co]_{0.5}@MIL-47(V)

- P. Milanov, K. Xu, A. Laha, E. Bugiel, R. Ranjith, D. Schwendt, H. J. Osten, H. Parala, R. A. Fischer, A. Devi, *J. Am. Chem. Soc.* **132** (2010) 36-37. Growth of Crystalline Gd₂O₃ Thin Films with a High-Quality Interface on Si(100) by Low-Temperature H₂O-Assisted Atomic Layer Deposition
- M. Molon, T. Cadenbach, T. Bollermann, C. Gemel, R. A. Fischer, *Chem. Commun* **46** (2010) 5677-5679. One electron organozinc ligands in metal rich molecules by Ga/Zn exchange: from Cp*Rh(GaCp*)₂ to Cp*Rh(ZnR)₄ units
- M. Mueller, A. Devaux, C.-H. Yang, C. L. De, R. A. Fischer, *Photochem. Photobiol. Sci.* **9** (2010) 846-853. Highly emissive metal-organic framework composites by host-guest chemistry
- G. Prabusankar, A. Doddi, C. Gemel, M. Winter, R. A. Fischer, *Inorg. Chem* **49** (2010) 7976-7980. P-P Bond Activation of P₄ Tetrahedron by Group 13 Carbenoid and its Bis Molybdenum Pentacarbonyl Adduct
- G. Prabusankar, C. Gemel, M. Winter, R. W. Seidel, R. A. Fischer, *Chem. Eur. J.* **16** (2010) 6041-6047. Group 13 Ligand Supported Heavy-Metal Complexes: First Structural Evidence for Gallium-Lead and Gallium-Mercury Bonds
- G. Prabusankar, S. Gonzalez-Gallardo, A. Doddi, C. Gemel, M. Winter, R. A. Fischer, *Eur. J. Inorg. Chem* (2010) 4415-4418. Linear coinage metal complexes stabilized by a group 13 metalloid ligand
- S. Schimpf, A. Rittermeier, X. Zhang, Z.-A. Li, M. Spasova, d. B. M. W. E. van, M. Farle, Y. Wang, R. A. Fischer, M. Muhler, *ChemCatChem* **2** (2010) 214-222. Stearate-Based Cu Colloids in Methanol Synthesis: Structural Changes Driven by Strong Metal-Support Interactions
- M. A. Sliem, T. Hikov, Z.-A. Li, M. Spasova, M. Farle, D. A. Schmidt, M. Havenith-Newen, R. A. Fischer, *Phys. Chem. Chem. Phys* **12** (2010) 9858-9866. Interfacial Cu/ZnO contact by selective photodeposition of copper onto the surface of small ZnO nanoparticles in non-aqueous colloidal solution
- K. Yusenko, M. Meilikhov, D. Zacher, F. Wieland, C. Sternemann, X. Stammer, T. Ladnorg, C. Woll, R. A. Fischer, *CrystEngComm* **12** (2010) 2086-2090. Step-by-step growth of highly oriented and continuous seeding layers of [Cu₂(ndc)₂(dabco)] on bare oxide and nitride substrates
- A. Devi, M. Hellwig, D. Barreca, H. Parala, R. Thomas, H.-W. Becker, Ram. S. Katiyar, R. A. Fischer, E. Tondello, *Chem. Vap. Deposition* **16** (2010) 157-165. Growth and Characterization of Ti-Ta-O Thin Films on Si Substrates by Liquid Injection MOCVD for High-k Applications from Modified Titanium and Tantalum Precursors
- J. Schwarzkopf, R. Dirsyte, A. Devi, M. Schmidbauer, G. Wagner, R. Fornari, *Thin Solid Films* **518** (2010) 4675-4679. Deposition of SrRuO₃ thin films on oxide substrates with liquid-delivery spin MOCVD
- R. Ranjith, A. Laha, E. Bugiel, H. J. Osten, K. Xu, A. P. Milanov, A. Devi *Semicond. Sci. Technol* **25** (2010) 105001-105005. Down scaling of defect passivated Gd₂O₃ thin films on p-Si(001) wafers grown by H₂O assisted atomic layer deposition
- K. Xu, A. P. Milanov, M. Winter, D. Barreca, A. Gasparotto, H.-W. Becker, A. Devi, *Eur. J. Inorg. Chem* **11** (2010) 1679-1688. Heteroleptic guanidinate and amidinate based complexes of hafnium as new precursors for MOCVD of HfO₂
- R. Thomas, P. Ehrhart, R. Waser, J. Schubert, A. Devi, R. S. Katiyar, *ECS Trans.* **33(3)** (2010) 211-219. Liquid injection MOCVD grown binary and ternary rare-earth oxides as alternative gate oxides for logic devices

- M. Tafipolsky, S. Amirjalayer, R. Schmid, *J. Phys. Chem. C* **114** (2010) 14402-14409. First-Principles-Derived Force Field for Copper Paddle-Wheel-Based Metal-Organic Frameworks
- O. Zybailo, O. Shekhah, H. Wang, M. Tafipolsky, R. Schmid, D. Johannsmann, C. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** (2010) 8092-8097. A novel method to measure diffusion coefficients in porous metal-organic frameworks
- M. Tafipolsky, S. Amirjalayer, R. Schmid, *Micropor. Mesopor. Mater.* **129** (2010) 304-318. Atomistic Theoretical Models for Nanoporous Hybrid Materials
- J. M. Macak, J. Pytel, J. Rodriguez Ruiz, R. Beranek. in "Advanced Nanostructured Solar Cells", *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **1211E** (2010) 1211-R08-34. Photoelectrochemical properties of electrospun titania nanofibers - comparison with nanoparticles
- D. Mitoraj, R. Beranek, H. Kisch, *Photochem. Photobiol. Sci.* **9** (2010) 31-38. Mechanism of aerobic visible light formic acid oxidation catalyzed by poly(tri-s-triazine) modified titania

Organische Chemie 1

- M.A. Bedau, J.S. McCaskill, N.H. Packard, S. Rasmussen *Artificial Life* **16** (2010) 89-97. Living technology: Exploiting life's principles in technology
- J.S. McCaskill "Living technology: 5 Questions", 111-121 (2010), book section, M.A. Bedau et al. (eds), Automatic Press, USA.
- U. Tangen *Artificial Life* **16** (2010) 311-328. Enzyme-like replication de novo in a micro-controller environment
- U. Tangen *Proceedings of the Artificial Life XII conference* (2010) 168-175. The emergence of replication in a digital evolution system using a secondary structure approach
- M. Beißwenger, T. Yoshiya, Y. Kiso, C. Cabrele, *J. Peptide Sci.* **16** (2010) 303-308. Synthesis and conformation of an analog of the helix-loop-helix domain of the Id1 protein containing the O-acetyl iso-prolyl-seryl switch motif
- W. Hild, K. Pollinger, A. Caporale, C. Cabrele, M. Keller, N. Pluym, A. Buschauer, R. Rachel, J. Tessmar, M. Breunig, A. Goepferich, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **107** (2010) 10667-10672. G protein-coupled receptors function as logic gates for nanoparticle binding and cell uptake
- A. Caporale, M. Sturlese, L. Gesiot, F. Zanta, A. Wittelsberger, C. Cabrele, *J. Med. Chem.* **53** (2010), 8072-8079. Side-chain cyclization based on serine residues: Synthesis, structure and activity of a novel cyclic analogue of the parathyroid hormone fragment 1-11

Organische Chemie 2

- P. Neuhaus, S. Henkel, W. Sander, *Aust. J. Chem.*, **63** (2010), 1634-1637. Electron paramagnetic resonance spectroscopic characterization of a,2- and a,4-didehydrotoluene
- P. Neuhaus, W. Sander, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **49** (2010), 7277-7280. Isolation and characterization of the triradical 1,3,5-trimethylenebenzene
- S. V. Chapyshev, P. Neuhaus, D. Grote, *J. Phys. Org. Chem.*, **23** (2010), 340-346. Matrix isolation and magnetic parameters of septet 3,5-dicyanopyridyl-2,4,6-trinitrene

- D. Grote, C. Finke, S. Kossmann, F. Neese, W. Sander, *Chem. Eur. J.*, **16** (2010), 4496-5406. 3,4,5,6-Tetrafluorophenylnitren-2-yl: A ground-state quartet triradical
- A. Mardyukov, W. Sander, *Eur. J. Org. Chem.*, **15** (2010), 2904-2909. Matrix isolation and IR characterization of the benzoyl and benzoylperoxy radicals
- M. Winkler, W. Sander, *Aust. J. Chem.*, **63** (2010), 1013-1047. Matrix isolation and electronic structure of di- and tridehydrobenzenes
- A. Mardyukov, R. Crespo-Otero, E. Sanchez-Garcia, W. Sander, *Chem. Eur. J.*, **16** (2010), 8679-8689. Photochemistry and reactivity of the phenyl radical-water system: A matrix isolation and computational study
- M. Kanthak, E. Muth, G. Dyker, *Eur. J. Org. Chem.* **2010**, 6084-6091. Hydrogenation and Dehydrogenation of Pentaphenylcyclopentadienes and Pentaphenylcyclopentenones
- G. Dyker, *CHEMKON* **17** (2010) 35. Das Experiment: Die gläserne Raucherlunge
- W. Hüggenberg, A. Seper, I. M. Oppel, G. Dyker, *Eur. J. Org. Chem.* **2010**, 6786-6797. Multifold Photocyclizations at Styrylcalix[4]arenes

Physikalische Chemie 1

- D. Constantinescu, C. Herrmann, H. Weingärtner, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** (2010) 1756–1763. Patterns of Protein Unfolding and Protein Aggregation in Ionic Liquids
- M. Wehner, C. Herrmann, *FEBS J.* **277** (2010) 1597–1605. Biochemical properties of the human guanylate binding protein 5 and a tumor-specific truncated splice variant
- C. Bee, A. Moshnikova, C. D. Mellor, J. E. Molloy, Y. Koryakina B. Stieglitz, A. Khokhlatchev, C. Herrmann, *J. Biol. Chem.* **285** (2010) 16258–16266. Growth and tumor suppressor NORE1A is a regulatory node between Ras signaling and microtubule nucleation
- D. Filchtinski, O. Sharabi, A. Rüppel, I. R. Vetter, C. Herrmann, J. M. Shifman, *J. Mol. Biol.* **399** (2010) 422–435. What makes Ras an efficient molecular switch: a computational, biophysical, and structural study of Ras-GDP interactions with mutants of Raf
- I. C. Rosnizeck, T. Graf, M. Spoerner, J. Tränkle, D. Filchtinski, C. Herrmann, L. Gremer, I. R. Vetter, A. Wittinghofer, B. König, H. R. Kalbitzer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **49** (2010) 3830–3833. Stabilizing a weak binding state for effectors in the human ras protein by cyclen complexes; *Angew. Chem.* **122** (2010) 3918–3922. Stabilisierung eines niederaffinen Zustands für Effektoren im menschlichen Ras-Protein durch Cyclenkomplexe
- T. Vöpel, A. Syguda, N. Britzen-Laurent, S. Kunzelmann, M. B. Lüdemann, C. Dovengerds, M. Stürzl, C. Herrmann, *J. Mol. Biol.* **400** (2010) 63–70. Mechanism of GTPase-activity-induced self-assembly of human guanylate binding protein 1
- S. Karassek, C. Berghaus, M. Schwarten, C. G. Goemans, N. Ohse, G. Kock, K. Jockers, S. Neumann, S. Gottfried, C. Herrmann, R. Heumann, R. Stoll, *J. Biol. Chem.* **285** (2010) 33979–33991. Ras homolog enriched in brain (Rheb) enhances apoptotic signaling
- J. Wiethaus, A. W. Busch, K. Kock, L. I. Leichert, C. Herrmann, N. Frankenberg-Dinkel, *J. Biol. Chem.* **285** (2010) 37561–37569. CpeS is a lyase specific for attachment of 3Z-PEB to Cys82 of {beta}-phycoerythrin from *Prochlorococcus marinus* MED4
- N. Britzen-Laurent, M. Bauer, V. Berton, N. Fischer, A. Syguda, S. Reipschläger, E. Naschberger, C. Herrmann and M. Stürzl, *PLoS ONE* **5** (2010) e14246, 1–11. Intracellular trafficking of Guanylate-binding proteins is regulated in a hierarchical manner: analogy to heteromeric G proteins

- A. Kerstan, T. Ladnorg, C. Grunwald, T. Vöpel, D. Zacher, C. Herrmann, C. Wöll, *Biointerphases* **5** (2010) 131–138. hGBP1 as a model system investigated by several surface techniques

Physikalische Chemie 2

- I. Kopf, C. Grunwald, E. Bründermann, L. Casalis, G. Scoles, M. Havenith, *J. Phys. Chem. C* **114** (2) (2010) 1306-1311. Detection of hybridization on nanografted oligonucleotides using scanning near-field infrared microscopy
- S. Kundu, W. Xia, W. Busser, M. Becker, D.A. Schmidt, M. Havenith, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**(17) (2010) 4351-4359. The formation of nitrogen-containing functional groups on carbon nanotube surfaces: a quantitative XPS and TPD study
- E. Bründermann, D.A. Schmidt, I. Kopf, M. Havenith, *AIP Conf. Proc.* **1214**, (2010) 7-9. Nano-spectroscopy and chemical nanoscopy of biomaterials, 5th Intl. Workshop on IR Microscopy and Spectroscopy (WIRMS 2009) with accelerator based sources
- K. Meister, J. Niesel, U. Schatzschneider, N. Metzler-Nolte, D.A. Schmidt, M. Havenith, *Angewandte Chemie Intl. Ed.* **49** (19) (2010) 3310-3312. Label-free imaging of metal-carbonyl complexes in live cells by Raman microspectroscopy (Cover article)
- K. Meister, D.A. Schmidt, E. Bründermann, M. Havenith, *Analyst* **135** (6) (2010) 1370-1374. Confocal Raman microscopy as an analytical tool to assess the mitochondrial status in human spermatozoa
- M. Krüger, E. Bründermann, S. Funkner, H. Weingärtner, M. Havenith, *J. Chem. Phys.* **132**(10) (2010) 101101/1-101101/4. Polarity fluctuations of the protic ionic liquid ethylammonium nitrate in the Terahertz regime
- N. Pérez-Hernández, T.Q. Luong, C. Pérez, J.D. Martín, M. Havenith, *PCCP* **12** (26) (2010) 6928-6932. Pore size dependent dynamics of confined water probed by FIR spectroscopy
- M. Filimon, I. Kopf, F. Ballout, D.A. Schmidt, E. Bründermann, J. Rühe, S. Santer, M. Havenith, *Soft Matter* **6** (2010) 3764-3768. Smart polymer surfaces: Mapping chemical landscapes on the nanometre scale
- M. Krüger, S. Funkner, B. Bründermann, M. Havenith, *Journal of Infrared, Millimeter and Terahertz Waves*. DOI: 10.1007/s10762-010-9669-1. Uncertainty and ambiguity in terahertz parameter extraction and data analysis
- M. Heyden, J. Sun, S. Funkner, G. Mathias, H. Forbert, M. Havenith, D. Marx, *PNAS* **107**(27) (2010) 12068-12073. Dissecting the THz spectrum of liquid water from first principles via correlations in time and space
- S. Ebbinghaus, K. Meister, B. Born, A.L. DeVries, M. Gruebele, M. Havenith, *J. Am. Chem. Soc.* **132**(35) (2010) 12210-12211. Antifreeze glycoprotein activity correlates with long-range protein-water dynamics
- A. Gutberlet, G. Schwaab, M. Havenith, *J. Chem. Phys.* **133** (2010) 154313/1 -154313/3. High resolution IR spectroscopy of HDO and HDO-(N₂)_n in helium nanodroplets
- M. Heyden, M. Havenith, *Methods* **52**(1) (2010) 74-83. Combining THz spectroscopy and MD simulations to study protein-hydration coupling
- M. Heyden, S. Ebbinghaus, M. Havenith, *Encyclopedia of Analytical Chemistry* DOI:10.1002/9780470027318.a9162, Published 15 December 2010. THz spectroscopy as a tool to study hydration dynamics

- Dhar, A. Samiotakis, S. Ebbinghaus, L. Nienhaus, D. Homouz, M. Gruebele and M.S. Cheung, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **107** (2010) 17586-17591. Structure, function, and folding of phosphoglycerate kinase are strongly perturbed by macromolecular crowding
- Dhar, S. Ebbinghaus, Z. Shen, T. Mishra and M. Gruebele, *Biophys. J.* **99** (2010) 69-71. The diffusion coefficient for PGK folding in eukaryotic cells
- S. Ebbinghaus, A. Dhar, J.D. McDonald and M. Gruebele, *Nature Methods* **7** (2010) 319-323. Protein folding stability and dynamics imaged in a living cell
- C. W. Müller, J. J. Newby, C.-P. Liu, C. P. Rodrigo, T. S. Zwier, *PCCP* **12** (2010) 2331-2343. Duschinsky mixing between four non-totally symmetric normal coordinates in the S_1 - S_0 vibronic structure of (*E*)-phenylvinylacetylene: A quantitative analysis
- J. J. Newby, C. W. Müller, C.-P. Liu, H. D. Lee, T. S. Zwier, *J. Am. Chem. Soc.* **132** (2010) 1611-1620. Probing *E/Z* isomerization on the $C_{10}H_8$ potential energy surface with ultraviolet population transfer spectroscopy
- J. J. Newby, C.-P. Liu, C. W. Müller, W. H. James III, E. G. Buchanan, H. D. Lee, T. S. Zwier, *J. Phys. Chem. A* **114** (2010) 3190-3198. Spectroscopy and photophysics of structural isomers of naphthalene: (*Z*)-phenylvinylacetylene
- D. Constatinescu, C. Herrmann, H. Weingärtner, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **12** (2010) 1756-1763. Patterns of protein unfolding and protein aggregation in ionic liquids.
- S. Bulut, P. Klose, M.-M. Huang, H. Weingärtner, P. J. Dyson, G. Laurenczy, G. Friedrich, J. Menz, K. Kummerer, I. Krossing, *Chem.-Eur. J.* **16** (2010) 13139-13154. Synthesis of room-temperature ionic liquids with the weakly coordinating $[Al(ORF)_4]^-$ anion ($R-F = CH-(CF_3)_2$) and the determination of their principal physical properties.
- M.-M. Huang, S. Bulut, I. Krossing, H. Weingärtner, *J. Chem. Phys.*, **133** (2010) Art No. 101101. Communication: Are hydrodynamic models suited for describing the reorientational dynamics of ions in ionic liquids? A case study of methylimidazolium tetra(hexafluoroisopropoxy)aluminates.
- M. Sajadi, Y. Ajaj, I. Ioffe, H. Weingärtner, N. P. Ernsting, *Angew. Chem.-Int. Ed.*, **49** (2010) 454-457. Terahertz spectroscopy of a liquid using a polarity probe. A case study of Trehalose/Water mixtures.

Analytische Chemie

- W. Jia, S. Schwamborn, C. Jin, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, L. Stoica, *PCCP* **12** (2010) 10088–10092. Towards a high potential biocathode based on direct bioelectrochemistry between horseradish peroxidase and hierarchically structured carbon nanotubes
- M. Bandilla, A. Zimdars, S. Neugebauer, M. Motz, W. Schuhmann, G. Hartwich, *Anal. Bioanal. Chem.* **398** (2010) 2617-2623. A microelectrochemical sensing system for the determination of epstein-barr-virus antibodies
- C. Jin, W. Xia, J. Guo, T. C. Nagaiah, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, in *10th International Symposium "Scientific Bases for the Preparation of Heterogeneous Catalysts"* (E.M. Gaigneaux, M. Devillers, S. Hermans, P. Jacobs, J. Martens, P. Ruiz (eds.), 2010, 161-169. Elsevier B.V. Carbon nanotube-supported sulfided Rh catalysts for the oxygen reduction reaction.
- M. Nebel, S. Neugebauer, H. Kiesele, W. Schuhmann *Electrochim. Acta* **55** (2010) 7923–7928. Local reactivity of diamond-like carbon modified PTFE membranes used in SO_2 sensors

- M. Nebel, K. Eckhard, T. Erichsen, A. Schulte, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **82** (2010) 7842–7848. 4D Shearforce-based constant distance mode scanning electrochemical microscopy (SECM)
- T. Schilling, A. Okunola, J. Masa, W. Schuhmann, M. Bron, *Electrochim. Acta* **55** (2010) 7597–7602. Carbon nanotubes modified with electrodeposited metalloporphyrines and phenanthrolines for electrocatalytic applications
- D. A. Guschin, J. Castillo, N. Dimcheva, W. Schuhmann, *Anal. Bioanal. Chem.* **398** (2010) 1661–1673. Redox electrodeposition polymers: Adaptation of the redox potential of polymer-bound Os complexes for bioanalytical applications
- M. Gębala, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **11** (2010) 2887–2895. Controlled orientation of DNA in a binary SAM as a key for the successful determination of DNA hybridization by means of electrochemical impedance spectroscopy
- C. Kulp, X. Chen, A. Puschhof, S. Schwamborn, W. Schuhmann, M. Bron *ChemPhysChem* **11** (2010) 2854–2861. Electrochemical synthesis of core-shell catalysts for electrocatalytic applications
- E. M. Hussein, W. Schuhmann, A. Schulte *Anal. Chem.* **82** (2010) 5900–5905. Shearforce-based constant-distance scanning electrochemical microscopy as fabrication tool for needle-type carbon-fiber nanoelectrodes
- N. Hüskens, M. Gebala, W. Schuhmann, N. Metzler-Nolte, *ChemBioChem* **11** (2010) 1754 – 1761. A single-electrode, dual-potential Ferrocene-PNA biosensor for the detection of DNA
- A. Schulte, M. Nebel, W. Schuhmann, *Annu. Rev. Anal. Chem.* **3** (2010) 299–318. Scanning electrochemical microscopy in neuroscience
- N. Li, Q. Xu, M. Zhou, W. Xia, X. Chen, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler *Electrochem. Commun.* **12** (2010) 939–943. Ethylenediamine-anchored gold nanoparticles on multi-walled carbon nanotubes: synthesis and characterization
- C. Jin, T. C. Nagaiah, W. Xia, B. Spliethoff, S. Wang, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler *Nanoscale* **2** (2010) 981–987. Highly thermostable metal-free and electrocatalytically active nitrogen-doped carbon nanotubes synthesized by coating with polyaniline
- M. Gębala, L. Stoica, D. Guschin, L. Stratmann, G. Hartwich, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **12** (2010) 684–688. A biotinylated intercalator for selective post-labeling of double-stranded DNA as a basis for high-sensitive DNA assays
- J. Bünsow, A. Enzenberg, K. Pohl, W. Schuhmann, D. Johannsmann *Electroanal.* **22** (2010) 978–984. Electrochemically induced formation of surface-attached temperature-responsive hydrogels. Amperometric glucose sensors with tunable sensor characteristics
- Y. Ackermann, D.A. Guschin, K. Eckhard, S. Shleev, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **12** (2010) 640–643. Design of a bioelectrocatalytic electrode interface for oxygen reduction in biofuel cells based on a specifically adapted Os-complex containing redox polymer with entrapped *Trametes hirsuta* laccase
- A. Maljusch, T.C. Nagaiah, S. Schwamborn, M. Bron, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **82** (2010) 1890–1896. Pt-Ag catalysts as oxygen-depolarized cathode material for hydrochloric acid electrolysis.
- L. Rassaei, M. Nebel, N.V. Rees, R.G. Compton, W. Schuhmann, F. Marken, *Chem. Commun.* **46** (2010) 812–814. Discharge cavitation during microwave electrochemistry

- C. Jin, W. Xia, T. C. Nagaiah, J. Guo, X. Chen, N. Li, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler *J. Mater. Chem.*, **20** (2010) 736-742. Rh-RhS_x nanoparticles grafted on functionalized carbon nanotubes as catalyst for the oxygen reduction reaction
- T. C. Nagaiah, S. Kundu, M. Bron, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **12** (2010) 338–341. Nitrogen-doped carbon nanotubes as a highly efficient cathode catalyst for the oxygen reduction reaction in alkaline medium
- S. Schwamborn, L. Stoica, X. Chen, W. Xia, S. Kundu, M. Muhler, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **11** (2010) 74-78. Patterned CNT arrays for the evaluation of oxygen reduction activity by SECM
- S. Naskar, S. Naskar, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, S. K. Chattopadhyay, *Polyhedron* **29** (2010) 493 - 499. Synthesis, crystal structures and spectroscopic properties of two Zn(II) Schiff's base complexes of pyridoxal.
- N. Pantcheva, R. Zhorova, M. Mitewa, S. Simova, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, *BioMetals* **23** (2010) 59 - 70. First solid state alkaline-earth complexes of monensic A acid (MonH): crystal structure of [M(Mon)₂(H₂O)₂] (M = Mg, Ca), spectral properties and cytotoxicity against aerobic gram-positive bacteria.
- B. B. Koleva, T. Kolev, T. Tsanev, S. Kotov, H. Mayer-Figge, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, *Spectrochimica Acta A Mol. Biol. Spectrosc.* **75** (2010) 172 - 176. Crystal structure and spectroscopic elucidation of 3-phenylpyridinium hydrogensquarate.
- N. Pantcheva, J. Ivanova, R. Zhorova, M. Mitewa, S. Simova, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick *Inorg. Chim. Acta* (2010). Nickel(II) and Zinc(II) dimonensinates: single crystal X-ray structure, spectral properties and bactericidal activity.
- M. Kokoschka, J.-A. Bangert, R. Stoll, W. S. Sheldrick, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2010) 1507-1515. Sequence-selective organoiridium DNA bis-intercalators with flexible dithiaalkane linker chains.
- A. Kromm, T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Z. Naturforsch.* **65b** (2010) 918 - 936. Solvothermal synthesis and structure of chalcogenidoarsenate anions.
- B. Koleva, R. Bakalska, R. W. Seidel, T. Kolev, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, M. Spiteller, *J. Mol. Struct.* **965** (2010) 89 - 97. Two new violurate and squarate salts of chinchonine - structures and physical properties.
- B. Ivanova, T. Kolev, M. Lamshöft, H. Mayer-Figge, R. W. Seidel, W. S. Sheldrick, M. Spiteller, *J. Mol. Struct.* **971** (2010) 8 - 11. Structural, spectroscopic and theoretical study of a novel ephedrinium salt.
- R. Bieda, M. Dobroschke, A. Triller, I. Ott, M. Spehr, R. Gust, A. Prokop, W. S. Sheldrick, *ChemMedChem* **5** (2010) 1123 - 1133. Cell selective apoptosis-inducing rhodium(III) crown thiaether complexes.
- Ivanova, N. Pantcheva, M. Mitewa, S. Simova, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, *Centr. Eur. J. Chem.* **8** (2010) 852 - 860. Crystal structures and spectral properties of new Cd(II) and Hg(II) complexes of monensic acid with different coordination modes of the ligand.
- B. B. Ivanova, R. W. Seidel, T. Kolev, W. S. Sheldrick, M. Spiteller, *Amino Acids* **39** (2010) 309 - 314. 2-(Phenylethyl)ammonium hydrogensquarate hemihydrate: crystal structure, solid-state IR-spectroscopic and theoretical characterization.
- R. Rubbiani, I. Kitanovic, H. Alborzinia, S. Can, A. Kitanovic, L. A. Onambele, M. Stefanopoulou, Y. Geldmacher, W. S. Sheldrick, G. Wolber, A. Prokop, S. Wölfl, I. Ott, *J. Med. Chem.* **53** (2010) 8608-8618. Benzimidazole gold(I) carbene complexes are antiproliferative TrxR inhibitors with improved stability towards glutathione and multiple antitumor properties.

- D. Tacheva, B. B. Ivanova, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, M. Spiteller, *Spectrochimica Acta A Mol. Biol. Spectrosc.* **77** (2010) 588 -593. Properties of the Michael's adducts of the substituted 2-amino-5-oxonitriles.
- Y. V. Mironov, S. G. Kozlova, S. J. Kim, W. S. Sheldrick, V. E. Federov, *Polyhedron* **29** (2010) 3283-3286. Dodecanuclear rhenium cluster complexes with an interstitial carbon atom: synthesis, structures and properties of two new compounds $K_6[Re_{12}CS_{17}(OH)_6] \times 4H_2O$ and $Na_{12}[Re_{12}CS_{17}(SO_3)_6] \times 48.5 H_2O$.
- B. Fränzel, C. Trötschel, C. Rückert, J. Kalinowski, A. Poetsch, D.A. Wolters. *Proteomics* **10** (2010), 445-457. Adaptation of *Corynebacterium glutamicum* to salt-stress conditions
- B. Fränzel, A. Poetsch, C. Trötschel, M. Persicke, J. Kalinowski, D. A. Wolters. *J Proteomics* **12** (2010) 2336-53. Quantitative proteomic overview on the *Corynebacterium glutamicum* l-lysine producing strain DM1730
- B. Franzel, C. Frese, , M. Penkova, N. Metzler-Nolte, J. E. Bandow, D. A. Wolters. *J Biol Inorg Chem* **8** (2010) 1293-303. *Corynebacterium glutamicum* exhibits a membrane-related response to a small ferrocene-conjugated antimicrobial peptide
- L. Steinsträßer, F. Jacobsen, T. Hirsch, M. Kesting, C. Chojnacki, C. Krisp, D. Wolters. *BMC Res Notes* **1** (2010) 335. Immunodepletion of high-abundant proteins from acute and chronic wound fluids to elucidate low-abundant regulators in wound healing
- F. Novak, N. Plumeré, B. Schetter, B. Speiser, D. Straub, H. A. Mayer, M. Reginek, K. Albert, G. Fischer, C. Meyer, H.-J. Egelhaaf and B. Børresen, *J. Solid State Electrochem.* **14** (2010) 289-303. Redox-Active Silica Nanoparticles. Part 4. Synthesis, Size Distribution, and Electrochemical Adsorption Behavior of Ferrocene- and (diamine)(diphosphine)-ruthenium(II)-modified Stöber Silica Colloidal Particles.
- L.B. Hu, H. Wu, F. La Mantia, Y. Yang, Y. Cui, *ACS Nano* **4** (2010) 5843-5848. Flexible secondary Li-ion batteries laminated on paper
- M. Pasta, F. La Mantia, Y. Cui, *Electrochem. Commun.* **12** (2010) 1407-1410. A new approach to glucose sensing at gold electrodes
- F. La Mantia, H. Habazaki, M. Santamaria, F. Di Quarto, *Russ. J. Electrochem.* **46** (2010) 1306-1322. A critical assessment of the Mott-Schottky analysis for the characterisation of passive film-electrolyte junctions
- M. Pasta, F. La Mantia, Y. Cui, *Electrochim. Acta* **55** (2010) 5561-5568. Mechanism of glucose electrochemical oxidation on gold surface
- M. Pasta, F. La Mantia, L.B. Hu, H.D. Deshazer, Y. Cui, *Nano Res.* **3** (2010) 452-458. Aqueous supercapacitors on conductive cotton
- F. La Mantia, M. Santamaria, F. Di Quarto, H. Habazaki, *J. Electrochem. Soc.* **157** (2010) C258-C267. Physicochemical characterisation of thermally aged anodic films on magnetron sputtered niobium
- L.B. Hu, M. Pasta, F. La Mantia, L.F. Cui, S. Jeong, H.D. Deshazer, J.W. Choi, S.H. Han, Y. Cui, *Nano Lett.* **10** (2010) 707-714. Stretchable conductive energy textiles
- M.E. Björketun, A.S. Bondarenko, B.L. Abrams, I. Chorkendorff, J. Rossmeisl. *PCCP* **12** (2010) 10536-10541. Screening of electrocatalytic materials for hydrogen evolution.
- G.A. Ragoisha, N.P. Osipovich, A.S. Bondarenko, J. Zhang, S. Kocha, A. Iiyama. *J. Solid State Electrochem.* **14** (2010) 531-542. Characterisation of the electrochemical redox behaviour of Pt electrodes by potentiodynamic electrochemical impedance spectroscopy.

Theoretische Chemie

- R. Turansky, M. Konopka, N. L. Doltsinis, I. Stich, D. Marx. *PCCP* **12** (2010) 13922-13932. Switching of functionalized azobenzene suspended between gold tips by mechanochemical, photochemical, and opto-chemical means.
- M. Baer, D. Marx, G. Mathias. *Angew. Chem. Int. Ed.* **49** (2010) 7346-7349. Theoretical Messenger Spectroscopy of Microsolvated Hydronium and Zundel Cations.
- S. A. Fiethen, V. Staemmler, N. N. Nair, J. Ribas-Arino, E. Schreiner, D. Marx. *J. Phys. Chem. B* **114** (2010) 11612-11619. Revealing the Magnetostructural Dynamics of [2Fe-2S] Ferredoxins from Reduced-Dimensionality Analysis of Antiferromagnetic Exchange Coupling Fluctuations.
- M. E. Tuckerman, A. Chandra, D. Marx. *J. Chem. Phys.* **133** (2010) 124108-1-22. A statistical mechanical theory of proton transport kinetics in hydrogen-bonded networks based on population correlation functions with applications to acids and bases.
- P. M. Kowalski, M. Farnesi-Camellone, N. N. Nair, B. Meyer, D. Marx. *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 146405-1-4. Charge Localization Dynamics Induced by Oxygen Vacancies on the TiO₂ (110) Surface.
- J. Sun, D. Bousquet, H. Forbert, D. Marx. *J. Chem. Phys.* **133** (2010) 114508-1-10. Glycine in aqueous solution: solvation shells, interfacial water, and vibrational spectroscopy from ab initio molecular dynamics.
- M. Heyden, J. Sun, S. Funkner, G. Mathias, H. Forbert, M. Havenith, D. Marx. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **107** (2010) 12068-12073. Dissecting the THz spectrum of liquid water from first principles via correlations in time and space.
- J. Ribas-Arino, M. Shiga, D. Marx. *J. Am. Chem. Soc.* **132** (2010) 10609-10614. Mechanochemical Transduction of Externally Applied Forces to Mechanophores.
- M. Böckmann, N. L. Doltsinis, D. Marx. *Angew. Chem. Int. Ed.* **49** (2010) 3382-3384. Unraveling a Chemically Enhanced Photoswitch: Bridged Azobenzene.
- S. D. Ivanov, O. Asvany, A. Witt, E. Hugo, G. Mathias, B. Redlich, D. Marx, S. Schlemmer. *Nat. Chem.* **2** (2010) 298-302. Quantum-Induced symmetry breaking explains infrared spectra of CH₅⁺ isotopologues.
- R. Turansky, M. Konopka, N. L. Doltsinis, I. Stich, D. Marx. *Chem. Phys. Chem.* **11** (2010) 345-348. Optical, Mechanical, and Opto-Mechanical Switching of Anchored Dithioazobenzene Bridges.
- N. N. Nair, J. Ribas-Arino, V. Staemmler, D. Marx. *J. Chem. Theor. Comput.* **6** (2010) 569-575. Magnetostructural Dynamics from Hubbard Corrected Spin-Projection: [2Fe-2S] Complex in Ferredoxins.
- M. Böckmann, N. L. Doltsinis, D. Marx. *J. Phys. Chem. A* **114** (2010) 745-754. Nonadiabatic Hybrid Quantum and Molecular Mechanic Simulations of Azobenzene Photoswitching in Bulk Liquid Environment.
- S. D. Ivanov, A. Witt, M. Shiga, D. Marx. *J. Chem. Phys.* **132** (2010) 031101-1-4. Communications: On artificial frequency shifts in infrared spectra obtained from centroid molecular dynamics: Quantum liquid water.
- J. Fulton, G. Schenter, M. Baer, C. J. Mundy, L. X. Dang, M. Balasubramanian. *J. Phys. Chem. B* **114** (2010) 12926-12937. Probing the Hydration Structure of Polarizable Halides: A Multi-Edge XAFS and Molecular Dynamics Study of the Iodide Anion.

- Y. Yao, D. D. Klug, J. Sun, R. Martonak. *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010) 209602. Comment on „Structural Prediction and Phase Transformation Mechanisms in Calcium at High Pressure“ (Reply).
- M. Kilic, J. A. Munn, W. A. Kurtis, P. M. Kowalski, T. von Hippel, H. C. Harris, E. J. Jeffery, S. DeGennaro, W. R. Brown, B. McLeod. *The Astrophysical Journal Letters* **715** (2010) L21-L25. Visitors from the Halo: 11 Gyr Old White Dwarfs in the Solar Neighborhood.
- H. Nieber, A. Hellweg, N. L. Doltsinis, *JACS* **132** (2010) 1778-1779. Recyclization rate of a photocleaved peptide from multiscale simulation.
- M. Gring, S. Gerlich, S. Eibenberger, S. Nimmrichter, T. Barrada, H. Ulbricht, M. Arndt, M. Müri, M. Mayor, M. Böckmann, N. L. Doltsinis, *Phys. Rev. A* **81** (2010) 032604. On the influence of the internal molecular dynamics on de Broglie interferometry.
- M. Baer, C. J. Mundy, T. M. Chang, F.-M. Tao, L. X. Dang, *J. Phys. Chem. B* **114** (2010) 7245-7249. Interpreting Vibartional Sum-Frequency Spectra of Sulfur Dioxide at the Air/Water Interface: A Comprehensive Molecular Dynamics Study.
- D. Marx, A. Chandra, M. E. Tuckerman, *Chem. Rev.* **110** (2010) 2174-2216. Aqueous Basic Solutions: Hydroxide Solvation, Structural Diffusion, and Comparison to the Hydrated Proton.
- H. Eshet, R. Z. Khaliullin, T. D. Kühne, J. Behler, M. Parrinello, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 184107. Ab initio quality neural-network potential for sodium
- R. Z. Khaliullin, H. Eshet, T. D. Kühne, J. Behler, M. Parrinello, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 100103. Ab initio quality study of the graphite-diamond phase coexistence
- C. Carbogno, J. Behler, K. Reuter, A. Groß, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 035410. Signatures of nonadiabatic O₂ dissociation at Al(111): First-principles fewest-switches study
- J. Behler, *Chem. Modelling* **7** (2010) 1. Neural Network Potential Energy Surfaces for Atomistic Simulations
- W. Klopper, R. A. Bachorz, D. P. Tew, C. Hättig, *Phys. Rev. A* **81** (2010) 022503. Sub-meV accuracy in first-principle computations of the ionization potentials and electron affinities of the atoms H to Ne.
- C. Hättig, D. P. Tew, A. Köhn, *J. Chem. Phys.* **131** (2010) 231102. Communications: Accurate and efficient approximations to explicitly correlated coupled-cluster singles and doubles, CCSD-F12
- S. Höfener, C. Hättig, W. Klopper, *Z. Phys. Chem.- Int. J. Res. Phys. Chem. & Chem. Phys.* **224** (2010) 695-708. Analytic Calculation of First-order Molecular Properties at the Explicitly-correlated Second-order Møller-Plesset Level.
- W. Klopper, R. A. Bachorz, C. Hättig, D. P. Tew, *Theo. Che. Acc.* **126** (2010) 289-304. Accurate computational thermochemistry from explicitly correlated coupled-cluster theory.
- D. H. Friese, C. Hättig, M. Rohe, K. Merz, A. Rittermeier, M. Muhler, *J. Phys. Chem. C* **114** (2010) 19415-19418. Oxidation of 2-Propanol by Peroxo Titanium Complexes: A Combined Experimental and Theoretical Study.
- A. J. A. Aquino, D. Nachtigallova, P. Hobza, D. G. Truhlar, C. Hättig, H. Lischka, *J. Comput. Chem.* **7** (2010) 1217-1227. The charge-transfer states in a stacked nucleobase dimer complex: A benchmark study.
- W. Kutzelnigg, *Int. J. Quantum Chem.* **110** (2010) 1443. The periodic table. Its story and its significance. (Book review).

- W. Kutzelnigg, K. R. Shamasundar, D. Mukherjee, *Mol. Phys.* **108** (2010) 433-451. Spinfree formulation of reduced density matrices, density cumulants, and generalized normal ordering.
- W. Kutzelnigg, *Angew. Chem.* **122** (2010) 2. Björn O. Roos (1937 – 2010).
- W. Kutzelnigg, *Angew. Chem. Int. ed.* **49** (2010) 4334. Björn O. Roos (1937-2010).
- W. Kutzelnigg, *J. Phys. Chem. A* **114** (2010) 8913. An alternative hierarchy of electron correlation beyond the electron-pair approximation.
- W. Kutzelnigg, P. Carsky et al. ed., Springer, 2010. “Unconventional aspects of coupled-cluster theory” in “Recent progress in coupled cluster methods”.
- A. Simmonett, J. Wilke, H.F. Schaefer III, and W. Kutzelnigg, *J. Chem. Phys.* **133** (2010) 174122. Density Cumulant Functional Theory: First Implementation and Benchmark Results for the DCFT-06 Model.

Technische Chemie

- W. Jia, S. Schwamborn, C. Jin, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, L. Stoica, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** (2010) 10088–10092. Towards a high potential biocathode based on direct between horseradish peroxidase and hierarchically structured carbon nanotubes
- C. Jin, W. Xia, J. Guo, T. C. Nagaiah, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, in 10th International Symposium “Scientific Bases for the Preparation of Heterogeneous Catalysts” (E.M. Gaigneaux, M. Devillers, S. Hermans, P. Jacobs, J. Martens, P. Ruiz (eds.), 2010, 161-169. Elsevier B.V. Carbon nanotube-supported sulfided Rh catalysts for the oxygen reduction reaction.
- N. Li, Q. Xu, M. Zhou, W. Xia, X. Chen, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *Electrochem. Commun.* **12** (2010) 939–943. Ethylenediamine-anchored gold nanoparticles on multi-walled carbon nanotubes: synthesis and characterization
- C. Jin, T. C. Nagaiah, W. Xia, B. Spliethoff, S. Wang, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *Nanoscale* **2** (2010) 981-987. Highly thermostable metal-free and active nitrogen-doped carbon nanotubes synthesized by coating with polyaniline
- C. Jin, W. Xia, T. C. Nagaiah, J. Guo, X. Chen, N. Li, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *J. Mater. Chem.* **20** (2010) 736-742. Rh-RhS_x nanoparticles grafted on functionalized carbon nanotubes as catalyst for the oxygen reduction reaction
- T. C. Nagaiah, S. Kundu, M. Bron, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **12** (2010) 338–341. Nitrogen-doped carbon nanotubes as a highly efficient cathode catalyst for the oxygen reduction reaction in alkaline medium
- S. Schwamborn, L. Stoica, X. Chen, W. Xia, S. Kundu, M. Muhler, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **11** (2010) 74-78. Patterned CNT arrays for the evaluation of oxygen reduction activity by SECM
- S. Schimpf, A. Rittermeier, X. Zhang, Z. Li, M. Spasova, M.W.E. van den Berg, M. Farle, Y. Wang, R. Fischer, M. Muhler, *ChemCatChem* **2** (2010) 214-222. Stearate-based Cu colloids in methanol synthesis: structural changes driven by strong metal-support interactions
- R. Chetty, K. Scott, S. Kundu, M. Muhler, *J. Fuel Cell Sci. Technol.* **7** (2010) 031011/1-031011/9. Optimization of mesh-based anodes for direct methanol fuel cells
- S. Kundu, W. Xia, W. Busser, M. Becker, D.A. Schmidt, M. Havenith, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** (2010) 4351-4359. The formation of nitrogen-containing functional groups on carbon nanotubes surfaces: A quantitative XPS and TPD study

- C. Jin, T.C. Nagaiah, W. Xia, B. Spliethoff, S. Wang, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *Nanoscale* **2** (2010) 981-987. Metal-free and electrocatalytically active nitrogen-doped carbon nanotubes synthesized by coating with polyaniline
- K. Kähler, M.C. Holz, M. Rohe, J. Strunk, M. Muhler, *ChemPhysChem* **11** (2010) 2521-2529. Probing the reactivity of ZnO and Au/ZnO nanoparticles by methanol adsorption: A TPD and DRIFTS study
- M. Polyakov, M. Poisot, M.W.E. van den Berg, T. Drescher, A. Lotnyk, L. Kienle, W. Bensch, M. Muhler, W. Grünert, *Catal. Commun.* **12** (2010) 231-237. Carbon-stabilized mesoporous MoS₂ – structural and surface characterization with spectroscopic and catalytic Tools
- B. Graf, H. Schulte, M. Muhler, *J. Catal.* **276** (2010) 66-75. The formation of methane over iron catalysts applied in Fischer-Tropsch synthesis: A transient and steady state kinetic study
- M. Becker, R. Naumann d'Alnoncourt, K. Kähler, J. Sekulic, R.A. Fischer, M. Muhler, *Chem. Vap. Deposition* **16** (2010) 85-92. The synthesis of highly loaded Cu/Al₂O₃ and Cu/ZnO/Al₂O₃ catalysts by the two-step CVD of Cu^{II}diethylamino-2-propoxide in a fluidized-bed reactor
- M. Behrens, A. Furche, I. Kasatkin, A. Trunschke, W. Busser, M. Muhler, B. Kniep, R. Fischer, R. Schlögl, *ChemCatChem* **2** (2010) 816-818. The potential of microstructural optimization in metal/oxide catalysts: Higher intrinsic activity of copper by partial embedding of copper nanoparticles
- W. Xia, B. Mei, M. Muhler, *Nanosci. Nanotechnol. Lett.* **2** (2010) 1-6. Gas-phase synthesis of gradient catalyst libraries consisting of nanoparticles supported on high surface area porous substrates
- S. Kaluza, M. Muhler, *Stud. Surf. Sci. Catal.* **175** (2010) 217-220. A novel continuous approach for the synthesis and characterization of pure and mixed metal oxide systems applied in heterogeneous catalysis
- D.H. Friese, C. Hättig, M. Rohe, K. Merz, A. Rittermeier, M. Muhler, *J. Phys. Chem. C* **114** (2010) 19415-19418. Oxidation of 2-propanol by peroxo titanium complexes: A combined experimental and theoretical study
- J.-P. Tessonnier, M. Becker, W. Xia, F. Girgsdies, R. Blume, L. Yao, D.S. Su, M. Muhler, R. Schlögl, *ChemCatChem* **2** (2010) 1559-1561. Spinel-type cobalt manganese-based mixed oxide as sacrificial catalyst for the high-yield production of homogeneous carbon nanotubes
- H. Noei, H. Qiu, Y. Wang, M. Muhler, Ch. Wöll, *ChemPhysChem* **11** (2010) 3604-3607. Hydrogen loading of oxide powder particles: A transmission IR study for the case of zinc oxide
- O. P. Tkachenko, L.M. Kustov, A. L. Tarasov, K. V. Klementiev, W. Grünert, N. Kumar, D. Yu. Murzin, *Current Topics in Catalysis* **8** (2009) 39-50 (published 2010). Supported Ru catalysts for aerobic piperonyl alcohol oxidation.
- 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 ?
- A. G. Popov, A. V. Smirnov, E. E. Knyaseva, V. V. Yuschenko, E. A. Kalistratova, K.V. Klementiev, W. Grünert, I. I. Ivanova, *Microporous Mesopor. Mat.* **134** (2010) 124-133. Propane conversion over Ni-, Co-, Fe-, and Zn-containing silicalites-1.
- S. V. Merzlikin, N. N. Tolkachev, L. E. Briand, T. Strunskus, C. Wöll, I. E. Wachs, W. Grünert, *Angew. Chemie Intern. Ed.* **49** (2010) 8037-8041. (*Angew. Chemie* **122** (2010))

- 8212-8216.) Anomalous surface compositions of stoichiometric mixed oxide compounds (Anomale Oberflächenzusammensetzung stöchiometrischer Mischoxidverbindungen)
- M. Polyakov, M. Poisot, M. W. E. van den Berg, T. Drescher, A. Lotnyk, L. Kienle, W. Bensch, M. Muhler, W. Grünert, *Catal. Comm.* **12** (2010) 231-237. Carbon-stabilized mesoporous MoS₂ – Structural and surface characterization with spectroscopic and catalytic tools
 - K. Routray, Wu Zhou, C. J. Kiely, W. Grünert, I. E. Wachs, *J. Catal.* **275** (2010) 84-98. Origin of the synergistic interaction between bulk metal oxide phases: selective oxidation of methanol to formaldehyde over bulk iron-molybdate catalysts.
 - E.V. Makshina, E.A.Zhilinskaya, S. Siffert, G.N. Mazo, A.Aboukaïs, W. Grünert, and B.V. Romanovsky, *J. Experimental Nanoscience* **5** (2010), 427-437. Nanostructured lanthanum cobaltate: oxidation and coordination states of Co atoms.
 - V. I. Isaeva, O. P. Tkachenko, I. V. Mishin, E. V. Afonina, G. I. Kapustin, L. M. Kozlova, W. Grünert, L. M. Kustov, *Stud. Surf. Sci. Catal* **175** (2010) 707-710. Novel dicarboxylate heteroaromatic metal organic frameworks as the catalyst supports for the hydrogenation reaction.
 - W. Grünert, *Chem.-Ing. Techn.* **82** (2010) 2231. „Concepts of Modern Catalysis and Kinetics“ von I. Chorkendorff und J. W. Niemantsverdriet, 2nd revised and enlarged edition (Wiley-VCH Weinheim 2007): Buchrezension.
 - A.A. Ismail, D.W. Bahnemann, L.Robben, V. Yarovy, M. Wark, *Chem. Mater.* **22** (2010) 108-116. Palladium Doped Porous Titania Photocatalysts: Impact of Mesoporous Order and Crystallinity
 - C. Aresipathi, A. Feldhoff, M. Wark, *J. Mater. Sci.* **45** (2010) 1179-1188. Ultra-long SiO₂ and SiO₂/TiO₂ tubes embedded with Pt nanoparticles using magnus green salt as templating structures
 - D.H. Taffa, M. Kathiresan, L. Walder, B. Seelandt, M. Wark, *Phys. Chem. Chem. Phys. (PCCP)* **12** (2010) 1473-1482. Pore size and surface charge control in mesoporous TiO₂ using post grafted SAMs
 - M. Sharifi, R. Marschall, M. Wilkening, M. Wark, *J. Power Sources* **195** (2010) 7781-7786. Proton Conductivity of Ordered Mesoporous Materials Containing Aluminium
 - K. Wessels, M. Wark, T. Oekermann, *Electrochim. Acta* **55** (2010) 6352-6357. Efficiency improvement of dye-sensitized solar cells based on electrodeposited TiO₂ films by low temperature post-treatment
 - S. Gruber, A. Gottschlich, H. Scheel, C. Aresipathi, I. Bannat, C. Zollfrank, M. Wark, *Phys. Status Solidi B* **247** (2010) 2401-2411. Molecular and supramolecular templating of silica-based nanotubes and introduction of metal nanowires
 - J. Rathouský, V. Kalousek, V. Yarovy, M. Wark, J. Jirkovský, *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* **216** (2010) 126-132. A low-cost procedure for the preparation of mesoporous layers of TiO₂ efficient in the environmental clean-up
 - M. Wark, *Chemie-Ingenieur-Technik* **82** (2010) 849-868, Komposite auf Basis von Zeolithen oder geordnet mesoporösen Oxiden für Anwendungen in der Photonik und Sensorik
 - M. Xu, Y. K. Gao, Y. Wang, Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** (2010) 3649-3652. Monitoring electronic structure changes of TiO₂(110) via sign reversal of adsorbate vibrational bands

- M. Calatayud, X. L. Yin, H. Qiu, Y. Wang, A. Birkner, C. Minot, Ch. Wöll, *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010) 119603. Comment on “Imaging of the Hydrogen Subsurface Site in Rutile TiO₂”
- S. Schimpf, A. Rittermeier, X. Zhang, Z. Li, M. Spasova, M. W. E. van den Berg, M. Farle, Y. Wang, R. A. Fischer, and M. Muhler, *ChemCatChem* **2** (2010) 214 – 222. Stearate-Based Cu Colloids in Methanol Synthesis: Structural Changes Driven by Strong Metal–Support Interactions
- C. Liang, L. Ding, C. Li, M. Pang, D. Su, W. Li, Y. Wang, *Energy Environ. Sci.* **3** (2010) 1121-1127. Nanostructured WCx/CNTs as highly efficient support of electrocatalysts with low Pt loading for oxygen reduction reaction

Biochemie 1

- C. Sager, D. Tapken, M. Hollmann, *Channels* **4**(3) (2010) 1-4. The C-terminal domains of TARPs: Unexpectedly versatile domains.
- N.A. Cavara, A. Orth, G. Seeböhm, G. Hicking, M. Hollmann, *BMC Neuroscience* **11**(art.133) (2010) 1-16, Residues at the tip of the pore loop of NR3-containing NMDA receptors determine Ca²⁺ permeability and Mg²⁺ block.
- E. Muth-Köhne, S. Pachernegg, M. Karus, A. Faissner, M. Hollmann, *Cellular Physiology and Biochemistry* **26** (2010) 935-946. Expression of NMDA receptors and Ca²⁺-impermeable AMPA receptors requires neuronal differentiation and allows discrimination between two different types of neural stem cells.
- J. Terhag, K. Gottschling, M. Hollmann, *Frontiers in Molecular Neuroscience* **3**(art.117) (2010) 1-11. The transmembrane domain C of AMPA receptors is critically involved in receptor function and modulation.
- J. Terhag, N.A. Cavara, M. Hollmann, *Methods* **51** (2010) 66-74. Cave canalem: How endogenous ion channels may interfere with heterologous expression in *Xenopus* oocytes.
- S.M. Schmid, M. Hollmann, *Science Signaling* **3** (136) (2010) pe28 (5 pp.), Bridging the synaptic cleft: Lessons from orphan glutamate receptors.
- P. Lafenêtre, O. Leske, Z.-L. Ma-Högemeier, A. Haghighi, Z. Bichler, P. Wahle, R. Heumann, *Frontiers in Behavioural Neuroscience* **3** (art.34) (2010) 1-9. Exercise can rescue recognition memory impairment in a model with reduced adult hippocampal neurogenesis.
- S. Eilebrecht, G. Brysbaert, T. Wegert, H. Urlaub, B.-J. Benecke, A. Benecke, *Nucleic Acids Research* **39** (6) (E-published ahead of print 17.11.2010) 2057-2072. 7SK small nuclear RNA directly affects HMGA1 function in transcription regulation.
- K. Eckey, N. Strutz-Seeböhm, G. Katz, U. Henrion, G. Fuhrmann, L. Pott, W.A. Linke, M. Arad, F. Lang and G. Seeböhm, *Cell. Physiol. Biochem.* **26** (2010) 503-512. Modulation of human Ether A Gogo Related Channels by CASQ2 contributes to Etiology of Catecholaminergic Polymorphic Ventricular Tachycardia (CPVT)
- N.A. Cavara, A. Orth, G. Hicking, G. Seeböhm and M. Hollmann, *BMC Neuroscience* **11** (2010) 133. Residues at the tip of the pore loop of NR3B-containing NMDA receptors determine Ca²⁺ permeability and Mg²⁺ block
- F. Lang, N. Strutz-Seeböhm, G. Seeböhm, U.E. Lang, *J Physiol.* **588** (2010) 3349-54. Significance of SGK1 in the regulation of neuronal function
- S. Maljevic, T.V. Wuttke, G. Seeböhm, H. Lerche, *Pflugers Arch.* **460**(2) (2010) 277-88. Kv7 channelopathies

- IS. Alesutan, ON. Ureche, J. Laufer, F. Klaus, A. Zürn, R. Lindner, N. Strutz-Seeböhm, JM. Tavaré, C. Boehmer, M. Palmada, UE. Lang, G. Seeböhm, F. Lang, *Cell Physiol Biochem*. **25**(2-3) (2010) 187-94. Regulation of the glutamate transporter EAAT4 by PIKfyve
- N. Strutz-Seeböhm and G. Seeböhm, *Heart Rate and Rhythm* (2010) – book chapter (editors: Tripathi, Ravens, Sanguinetti) K channel openers as new antiarrhythmic agents

Biochemie 2

- M. Epple, K. Ganesan, R. Heumann, J. Klesing, A. Kovtun, S. Neumann, V. Sokolowa, *Journal of Materials Chemistry*, **20** (2010) 18-23. Application of calcium phosphate nanoparticles in biomedicine.
- P. Lafenetre, O. Leske, Z. Ma-Högemeier, A. Haghighi, Z. Bichler, P. Wahle, R. Heumann, *Front Behav Neurosci*. **22** (2010) 3-34. Exercise can rescue recognition memory impairment in a model with reduced adult hippocampal neurogenesis.
- M. Manns, Z. Bichler, O. Leske, R. Heumann, *Genes, Brain and Behavior*, **9** (2010) 525-36. Neuronal Ras activation inhibits adult hippocampal progenitor cell division and impairs spatial short-term memory.
- V. Sokolova, S. Neumann, A. Kovtun, S. Chernousova, R. Heumann, and M. Epple. *Journal of Materials Science* **45** (2010) 4952-57. An outer shell of positively charged poly(ethyleneimine) strongly increases the transfection efficiency of calcium phosphate/DNA nanoparticles.
- G. Kock, M. Dicks, R. Heumann, KS Erdmann, R. Stoll, *Biomol. NMR Assign.* **4** (2010) 199 – 202. Sequence-specific (¹H), (¹³C), and (¹⁵N) assignment of the extended PDZ3 domain of the protein tyrosine phosphatase basophil-like PTP-BL.
- J. Klesing, S. Chernousova, A. Kovtun, S. Neumann, L. Ruiz, J. Gonzales-Calbet, M. Vallet-Regi, R. Heumann, and M. Epple, *Journal of Materials Chemistry* **20** (2010) 6144-48. An injectable paste of calcium phosphate nanorods, functionalized with nucleic acids, for cell transfection and gene silencing.
- S. Karassek, C. Berghaus, M. Schwarten, C. Goemans, N. Ohse, G. Kock, K. Jockers, S. Neumann, S. Gottfried, C. Herrmann, R. Heumann and R. Stoll, *J. Biol. Chem.* **285** (2010) 33979-33991. Ras homolog enriched in brain (Rheb) enhances apoptotic signalling,
- P. Happel, K. Möller, R. Kunz, I. D. Dietzel, *BMC Bioinformatics* **11** (2010) 323: A boundary delimitation algorithm to approximate cell soma volumes of bipolar cells from topographical data obtained by scanning probe microscopy
- M. Kokoschka, J.-A. Bangert, R. Stoll, W.S. Sheldrick, *European Journal of Inorganic Chemistry* **10** (2010) 1507-1515. Sequence-selective organoiridium DNA bis-intercalators with flexible dithiaalkane linker chains.
- G. Kock, M. Dicks, R. Heumann, K. S. Erdmann, R. Stoll, *Biomolecular NMR Assignments* **4** (2010) 199-202. Sequence-specific ¹H, ¹³C, and ¹⁵N assignment of the extended PDZ3 domain of the protein tyrosine phosphatase basophil-like PTP-BL.
- S. Karassek, C. Berghaus, M. Schwarten, C. G. Goemans, N. Ohse, G. Kock, K. Jockers, S. Neumann, S. Gottfried, C. Herrmann, R. Heuman, R. Stoll, *The Journal of Biological Chemistry* **285** (2010) 33979-33991. Ras homolog enriched in Brain (Rheb) enhances apoptotic signalling.

- S. Aust, F. Brüsselbach, S. Pütz, and B.T. Hovemann, *J. Biol. Chem.*, **285** (2010) 20740-47. Alternative tasks of *Drosophila* Tan in neurotransmitter recycling vs cuticle sclerotization disclosed by kinetic properties

Didaktik der Chemie

- Sommer, K.; Russek, A.; Kleinhorst, H., *Chemkon* **17** (2010) 4, 1-8. KEMIE – Kinder erleben mit ihren Eltern Chemie - Didaktische Konzeption und Umsetzung eines langfristig angelegten Eltern-Kind-Projektes
- Vogler, K.; Sommer, K.: *UC* **21** (2010) 120, 28-31. Chemische Analyse einer Volksweisheit.
- Russek, A.; Kakoschke, A.; Sommer, K., *UC* **21** (2010) 118/119, 94-97. Was bleibt - Untersuchungen über Einstellungen und Werthaltungen zum Chemieunterricht bei Eltern
- Schuhmann, A.; Sommer, K., *UC* **21** (2010) 118/119, 84-88. Ein blaues Wunder erleben – Lavendelöl unter der chemischen Lupe
- Stäudel, L.; Pfeifer, P., Sommer, K., *UC* **21** (2010) 118/119, 41-49. Standardsituationen des Unterrichts das Wesen der Naturwissenschaften erkennen
- Lorke, J.; Sommer, K., *UC* **21** (2010) 117, S.24-27. Literaturarbeit im Chemieunterricht
- Metzger, S.; Sieve, B.; Sommer, K., *UC* **21** (2010) 117, S.2-7. Chemische Inhalte präsentieren - Ein Beitrag zum Kompetenzbereich Kommunikation
- Lorke, J. & Sommer, K., *Problems of Education in the 21st century* **19** (2010) 63-69. Teaching chromatography in secondary school – an investigation concerning grade, context, content, experiments and media
- Metzger, S.; Sommer, K., *MNU* **63** (2010) 1, S.4-11. „Kochrezept“ oder Experimentelle Methode – Eine Standortbestimmung von Schülerexperimenten unter dem Gesichtspunkt der Erkenntnisgewinnung
- **Schulbuch:**
Deißenberger, H.; Sommer, K.; Steffensky, M. (Hsrg.): *Natürlich Chemie – 10 NTG*. C.C. Buchners Verlag, Bamberg 2010

Promotionen

Lüdemann, Maik-Borris Alexander

Charakterisierung des humanen Guanylat-bindenden Proteins 1 mit Hilfe von dynamischer Lichtstreuung und Deuteriumaustausch

Prof. Dr. Ch. Herrmann

23.12.2010

Hüsken, Nina Simone

Ferrocene-PNA Recognition Layers - Probe Design, Interfacial and Electron Transfer Studies and DNA Detection Strategies

Prof. Dr. N. Metzler-Nolte

20.12.2010

Laaboudi, Abdellaziz

Sauerstoffreduktion auf Thiol-modifizierten Au(111)-Oberflächen

Prof. Dr. M. Stratmann

20.12.2010

Piekielska, Katarzyna

Entwicklung und impedimetrische Untersuchung eines RNA-Assays zur Selektion aktiver Hairpinribozyme

Prof. Dr. W. Schuhmann

20.12.2010

Ziegler, Anna Barbara

Untersuchungen zur Aspartatdecarboxylase Black im visuellen System von *Drosophila melanogaster*

Prof. Dr. B. Hovemann

17.12.2010

Witt, Michael Alexander

Quantum Simulation of Molecular Systems Dynamics and IR Spectroscopy of CH_5^+ , its Isotopologues, and Microsolvated Species

Prof. Dr. D. Marx

17.12.2010

Rucktäschel, Robert

Funktionsanalyse von Komponenten der peroxisomalen Membranbiogenese in der Hefe *Saccharomyces cerevisiae*

Prof. Dr. R. Erdmann

17.12.2010

Kerstan, Andreas

Untersuchung von spezifischen Protein-Protein-Interaktionen am Beispiel von hGBP1 und strukturelle Charakterisierung von proteinresistenten Peptidthiolen

Prof. Dr. Ch. Wöll

10.12.2010

Liu, Jinxuan

Self-assembled Monolayers of Functional Group-terminated Molecules on Au

Prof. Dr. Ch. Wöll

10.12.2010

Finke, Jochen Christopher

Matrixisolation und spektroskopische Charakterisierung verschiedener aromatischer und heteroaromatischer Nitrenradikale und Polynitrene

Prof. Dr. W. Sander

26.11.2010

Gao, Youkun

Probing the Interaction of Small Organic Molecules on Metal Oxide Surfaces

Prof. Dr. Ch. Wöll

12.11.2010

Kanthak, Matthias

Pentaarylcyclopentadiene und chirale Ruthenium-Chelat-Komplexe

Prof. Dr. G. Dyker

12.11.2010

Feyen, Mathias Andreas

Preparation of Novel Iron-Based Core-Shell Nanoparticles and Their Application in Heterogeneous Catalysis

Prof. Dr. F. Schüth

05.11.2010

Mayer-Gall, Thomas

Synthese von Porphyrinen und nanodimensionierten Porphyrin-Arrays als Liganden für Palladium-Nanopartikel und heterogene Katalyse mit Porphyrinen an polymeren Trägern

Prof. Dr. G. Dyker

05.11.2010

Neuhaus, Patrik

Synthesis and Characterization of Organic High-Spin Molecules

Prof. Dr. W. Sander

22.10.2010

Baer, Marcel Dominik

Theoretical Vibrational Spectroscopy of Protonated Water Networks: In the Gas Phase and Bacteriorhodopsin

Prof. Dr. D. Marx

15.10.2010

Berkermann, Frederic

Preparation and Application of Aqueous Iridium Oxide Colloids

Prof. Dr. M. T. Reetz

14.10.2010

Dieckmann, Arne

Experimentelle und theoretische Analyse eines diastereoselektiven artifiziellen Replikators
Prof. Dr. G. von Kiedrowski
27.09.2010

Dicks, Markus

Strukturelle und funktionale Charakterisierung der Tandemdomäne PDZ2/3 der PTP-BL
Prof. Dr. Raphael Stoll
24.09.2010

Karassek, Sascha

Einfluss der kleinen GTPase *Ras homologue enriched in brain* (Rheb) auf die stressinduzierte Apoptose
Prof. Dr. R. Heumann
24.09.2010

Heyden, Matthias

Properties of Water at Tera-Hertz Frequencies and Picosecond Timescales
Prof. Dr. M. Havenith-Newen
24.09.2010

Wang, Hui

Facile Route for Synthesis and Controlled Growth of SURMOFs on Functionalized Organic Surfaces
Prof. Dr. Ch. Wöll
17.09.2010

Jäger, Anneli

Mechanism by which Th17 cells induce tissue inflammation and autoimmunity
Prof. Dr. R. Heumann
09.09.2010

Gottfried, Sebastian

Recovery of adult hippocampal neurogenesis and short-term memory in synRas mice by knock-out of the transcriptional co-regulator Tis21
Prof. Dr. R. Heumann
09.09.2010

De Toni, Andrea

CO-Oxidation an Au/TiO₂ Aggregaten stabilisiert in einer mesoporösen MCM-48 Matrix: Studien zur Aktivität, Vergiftung und Träger/Metall-Wechselwirkung
Prof. Dr. W. Grünert
03.09.2010

Kähler, Kevin

On the role of metal-support interactions in methanol synthesis and oxidation
Prof. Dr. M. Muhler
03.09.2010

Jin, Chen

The vapor phase modifications and application in electrocatalysis of carbon nanotubes
Prof. Dr. M. Muhler
03.09.2010

Mardyukov, Artur

Aggregation of Small Molecules in Cryogenic Matrices and Reaction of Aryl Radicals with
Small Molecules Matrix Isolation and Computational Studies
Prof. Dr. W. Sander
06.08.2010

Kille, Sabrina

Flavoproteins in Directed Evolution Iterative CASTing to evolve YqjM and P450_{BM3}
Prof. Dr. M. T. Reetz
06.08.2010

Götze, Silke

Epigenetische Regulation im Wnt Signalweg
Prof. Dr. Oliver Müller
23.07.2010

Sager, Charlotte

Untersuchungen zur Wechselwirkung von AMPA-Rezeptoren mit TARPs
Prof. Dr. M. Hollmann
23.07.2010

Fränzel, Benjamin

Integrale Membranproteine im Fokus quantitativer Proteomforschung für medizinische
Anwendungen und biotechnologische Fragestellungen am Beispiel von *Corynebacterium*
glutamicum und *Escherichiae coli*
Dr. Dirk Wolters
23.07.2010

Hensel, Astrid

Beteiligung der PTS-Rezeptoren von *Saccharomyces cerevisiae* an der Translokation von
Matrixproteinen über die peroxisomale Membran
Prof. Dr. R. Erdmann
23.07.2010

Bartho, Kathrin

Massenspektrometrische Identifizierung von Membranproteinen aus humanen Spermatozoen
Dr. Dirk Wolters
22.07.2010

Döring, Jens

Gasphasenhydrierung von 1,3-Butadien an komplexen Metallhydriden
Prof. Dr. F. Schüth
13.07.2010

Pawelke, Roland Hermann

Arbeiten zu instabilen komplexen Hydriden des Aluminiums Versuche zur Entwicklung neuartiger Verbindungen für die reversible chemische Speicherung von Wasserstoff

Prof. Dr. F. Schüth

13.07.2010

Kirchhoff, Mark

High Temperature Stable Supported Catalysts and their Application in the Catalytic Partial Oxidation of Methane to Synthesis Gas

Prof. Dr. F. Schüth

13.07.2010

Liu, Yong

Novel Catalytic Materials for Glycerol Utilization and CO Oxidation

Prof. Dr. F. Schüth

13.07.2010

Breuer, Niklas Alexander

Ruthenium dioxide as oxidation catalyst for CO and methanol: High-vacuum and atmospheric pressure kinetics

Prof. Dr. M. Muhler

02.07.2010

Thoß, Melanie

Peptide aus chiralen Binaphthylaminosäuren

Prof. Dr. M. Feigel

01.07.2010

Jacob, Wright

Molecular role of Leucine-rich repeat kinase2 (LRRK2) in Parkinson's disease models

Prof. Dr. R. Heumann

30.06.2010

Schulenburg, Thomas

Differenzielle und Quantitative Analyse eines transgenen Mausmodells mit endogener Dysfunktion des Proteasoms

Prof. Dr. Katrin Marcus

18.06.2010

Filthaus, Matthias

Synthese, Charakterisierung und Untersuchung zum Reaktionsverhalten von Boraziden und Borylnitrenen C-H-Transformation und direkte Aminierung von Alkanen

Prof. Dr. H. Bettinger

18.06.2010

Mucha, Elena

Identifizierung und Charakterisierung von ROP-Effektoren und ihren Interaktionspartnern beim polaren Zellwachstum in Pflanzen

Prof. Dr. A. Wittinghofer

18.06.2010

Born, Benjamin Philipp

Terahertz Spectroscopy of Proteins Hydration Dynamics of Proteins during Folding, Enzyme Catalysis and in Chemical Equilibrium

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

01.06.2010

Krüger, Matthias Patrick

Systematic THz Dielectric Spectroscopy of Ionic Liquids

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

01.06.2010

Penkova, Maya

Arginine and Tryptophan Rich Antimicrobial Peptides (AMPs) Modifications, Application and Mode of Action

Prof. Dr. N. Metzler-Nolte

21.05.2010

Filimon, Marlena

Mapping chemical smart polymer surfaces on nanometer scale

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

21.05.2010

Estevez Rivera, Hebert Jesus

Functionalization and Synthesis of Calixarenes for Design of Supramolecular Architectures by Self-Assembly and Preparation of Extended π -Conjugate Systems

Prof. Dr. G. Dyker

21.05.2010

Zhang, Xiaoning

Microstructural Characterisation of Composite Nanomaterials for Catalysis: Cu/ZnO Colloids & Nanoparticles@MOFs

Prof. Dr. R. A. Fischer

17.05.2010

Groß, Annika

Synthese und biologische Testung von Metallocen-Peptidkonjugaten an humanen Karzinomzelllinien

Prof. Dr. N. Metzler-Nolte

14.05.2010

Bieda, Ruth

Design, DNA interaction and biological function of cell selective cytotoxic Rh(III) compounds

Prof. Dr. W. S. Sheldrick

12.05.2010

Gebala, Magdalena

From impedimetric investigation of the surface architecture to label-free DNA assays

Prof. Dr. W. Schuhmann

07.05.2010

Gumulya, Yosephine

Exploration of Evolutionary Pathways of *Aspergillus niger* Epoxide Hydrolase

Prof. Dr. M. T. Reetz

06.05.2010

Constantinescu, Diana

Patterns of Protein Stability and Interactions in Water-Cosolvent Systems

Prof. Dr. Ch. Herrmann

29.04.2010

Blißenbach, Maik

Einfluss des Rev Proteins auf die Verpackung der genomischen RNA des Humanen

Immundefizienzvirus

Prof. Dr. med. K. Überla

23.04.2010

Vöpel, Tobias

Inter- und intramolekulare Wechselwirkungen von hGBP1-Domänen

Prof. Dr. Ch. Herrmann

23.04.2010

Happel, Patrick

Lokale Volumenänderung migrierender Oligodendrozyten-Vorläuferzellen bestimmt mithilfe der Raster-Ionenleitfähigkeitsmikroskopie

Prof. Dr. I. Dietzel-Meyer

16.04.2010

Bazula, Piotr Antoni

Nanostructured Oxidic Materials: Properties and Application of Core@Shell Spheres and Hollow Particles

Prof. Dr. F. Schüth

30.03.2010

Milanov, Andrian Petrov

MOCVD and ALD of Rare Earth Containing Multifunctional Materials: From Precursor Chemistry to Thin Film Deposition and Applications

Jun.-Prof. Dr. Anjana Devi

26.03.2010

Kompio, Patrick

Der Einfluss von Hochtemperaturbehandlungen auf V_2O_5 - WO_3 / TiO_2 -Katalysatoren für die selektive katalytische Reduktion von Stickoxiden mit Ammoniak

Prof. Dr. W. Grünert

26.03.2010

Filchtinski, Daniel

Strukturelle und biophysikalische Charakterisierung kleiner GTPasen mit ihren Effektoren

Prof. Dr. Ch. Herrmann

24.03.2010

Kucera, Nicole

Strukturelle und funktionelle Analyse des Photorezeptormechanismus der Insekten
CRYPTOCHROME sowie der PAS-Domänen Interaktionen der Uhrenproteine Maus
PERIOD 1 und 3
PD Dr. Eva Wolf
05.03.2010

Noei, Heshmat

Vibrational Spectroscopic Studies on Adsorption and Reactions over ZnO-based Catalysis
Prof. Dr. M. Muhler
26.02.2010

Rittermeier, André

Alternative catalysts for the synthesis of methanol in the liquid phase
Prof. Dr. M. Muhler
09.02.2010

Jäger, Ronald

GAF-Domänen-vermittelte Aktivierung von Phosphodiesterasen durch zyklische Nukleotid
Prof. Dr. med. D. Koesling
29.01.2010

Seidel, Rüdiger

Supramolecular and Metallosupramolecular Chemistry of Disulfide and Porphyrin Based
Building Blocks
PD Dr. Iris Oppel
22.01.2010