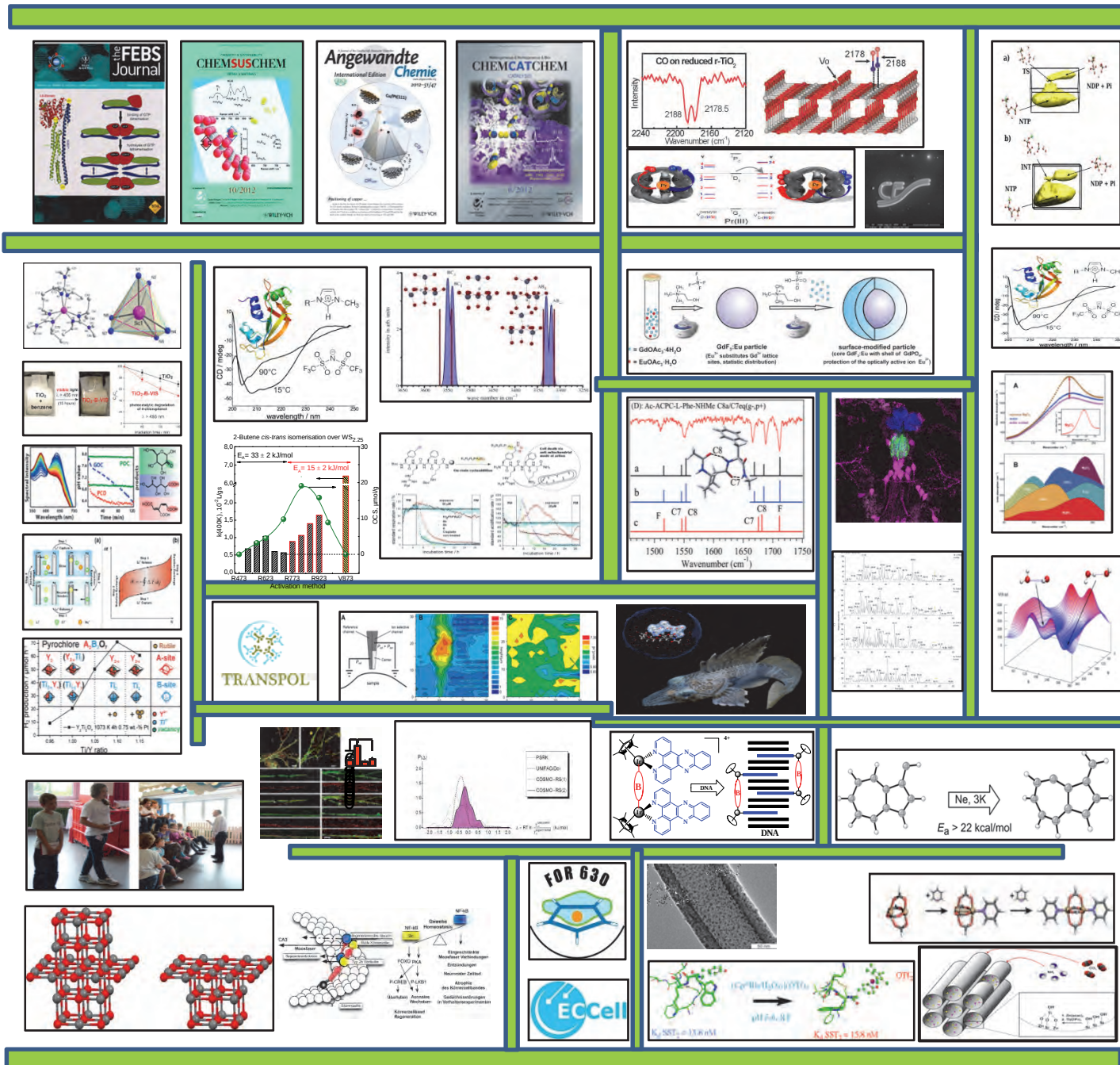


Ruhr-Universität Bochum

Fakultät für Chemie und Biochemie

Forschung 2012



Research 2012

Faculty of Chemistry and Biochemistry

Ruhr-Universität Bochum

Wie seit 2001 soll auch dieser Jahresbericht wieder einen kurzen Einblick über die Vielfalt der Forschung an der Fakultät für Chemie und Biochemie der Ruhr-Universität Bochum bieten. Sollten sie weiterführendes Interesse haben, wenden sie sich doch bitte an die Leiter/innen der Arbeitsgruppen, deren Adressen bei den jeweiligen Highlights genannt sind. Die Homepage der Fakultät (<http://www.chemie.rub.de/>) ist auch eine sehr aktuelle Quelle weiterführender Information.

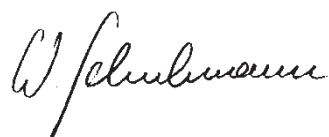
Since 2001 the yearly compiled report of the faculty of chemistry and biochemistry of the Ruhr-Universität Bochum is again providing a short insight view about the diversity of the research performed in the year 2012. If you need additional information, you are welcome to contact the research groups 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, Mai 2013



(Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann)

Beispiele aus der Forschung

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 1

Prof. Dr. Nils Metzler-Nolte	4
Dr. Michael Seitz	5

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2

Prof. Dr. Roland Fischer (Organometallics & Materials)	6
Prof. Dr. Anjana Devi (Chemie anorganischer Materialien)	7
Dr. Rochus Schmid	8
JP Dr. Radim Beranek	9

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 3

Prof. Dr. Anja Mudring (Festkörperchemie und Materialien)	10
---	----

Lehrstuhl für Organische Chemie 1

Prof. Dr. John McCaskill	11
--------------------------------	----

Lehrstuhl für Organische Chemie 2

Prof. Dr. Wolfram Sander	12
--------------------------------	----

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1

Prof. Dr. Karina Morgenstern	13
Prof. Dr. Christian Herrmann (Protein-Interaktionen)	14

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 2

Prof. Dr. Martina Havenith-Newen	15
JP Dr. Simon Ebbinghaus	16
Dr. Christian Müller	17
Prof. Dr. Hermann Weingärtner	18

Lehrstuhl für Analytische Chemie

Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann	19
Prof. Dr. Axel Rosenhahn	20
Prof. Dr. William Sheldrick	21
Dr. Dirk Wolters	22
Dr. Nicolas Plumere	23
Dr. Fabio La Mantia	24
Dr. Aliaksandr Bandarenka	25

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Dominik Marx	26
Dr. Jörg Behler	27
Prof. Dr. Christof Hättig	28
Prof. Dr. Volker Staemmler	29
Prof. Dr. Robert Franke	30

Lehrstuhl für Technische Chemie

Prof. Dr. Martin Muhler	31
Prof. Dr. Wolfgang Grünert (Struktur/Reaktivität heterogener Katalysatoren)	32
Prof. Dr. Michael Wark	33
Dr. Yuemin Wang	34
Dr. Jennifer Strunk	35

Lehrstuhl für Biochemie 1

Prof. Dr. Michael Hollmann (Rezeptorbiochemie)	36
--	----

Lehrstuhl für Biochemie 2

Prof. Dr. Rolf Heumann (Molekulare Neurobiochemie)	37
Prof. Dr. Irmgard Dietzel-Meyer	38
Prof. Dr. Raphael Stoll	39
Prof. Dr. Bernhard Hovemann	40

Lehrstuhl für Didaktik der Chemie

Prof. Dr. Katrin Sommer	41
-------------------------------	----

Exzellenzcluster RESOLV	42
Forschungsbau ZEMOS	43
Forschergruppe 630	44
Zentrum für Elektrochemie (CES)	45
Transport and signalling mechanisms in polarized cells (TRANSPOL)	46

Veröffentlichungen

Anorganische Chemie 1	47
Anorganische Chemie 2	49
Anorganische Chemie 3	51
Organische Chemie 1	51
Organische Chemie 2	52
Physikalische Chemie 1	52
Physikalische Chemie 2	54
Analytische Chemie	55
Theoretische Chemie	61
Technische Chemie	64
Biochemie 1	68
Biochemie 2	69
Didaktik der Chemie	71

Promotionen 2012	72
-------------------------------	----

Nils Metzler-Nolte

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

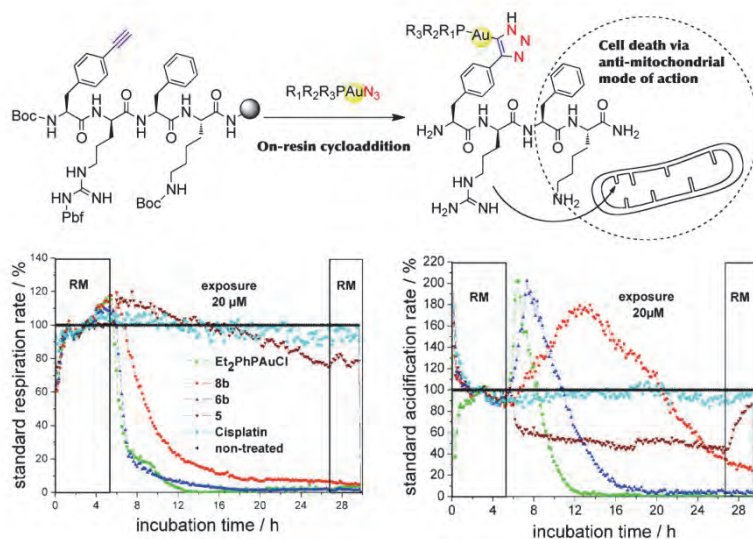
Tel.: ++49-(0)234-3224153; FAX: ++49-(0)234-3214378

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

S. D. Köster, H. Alborzinia, S. Can, I. Kitanovic, S. Wölfl, R. Rubbiani, I. Ott, P. Riesterer, A. Prokop, K. Merz, N. Metzler-Nolte, *Chem. Sci.* **3** (2012) 2062 – 2072. A Spontaneous Gold(I)-Azide Alkyne Cycloaddition Reaction Yields Gold-Peptide Bioconjugates which Overcome Cisplatin Resistance in a p53-Mutant Cancer Cell Line

In dieser Arbeit beschreiben wir einen neuen Weg zu Gold-Peptidkonjugaten über die unkatalysierte [2+3] Cycloadditionsreaktion von Goldaziden mit Alkynylpeptiden. Die synthetisierten Au(I)-Tetrapeptidkonjugate mit Mitochondrien-lokalisierenden Peptiden zeigen gute antiproliferative Aktivität gegen Krebszellen (2 – 50 μ M). Die zelluläre Aufnahme von Au

wurde mittels AAS bestimmt und zeigt eine deutliche Korrelation mit der Zytotoxizität. Zellatmung und Azidifizierung gehen unmittelbar mit der Behandlung einher, und essentielle zelluläre Funktionen sind nach spätestens 12 h terminal beeinflusst. Der Wirkmechanismus der neuen Gold-Bioconjugate wurde mit einer Vielzahl von biochemischen und zellbiologischen Assays aufgeklärt, die letztlich die Induktion von Apoptose über die Mitochondrien nahelegen. Interessanterweise konnte die Resistenz von MDA-MB231 Zellen gegen das bekannte Chemotherapeutikum Cisplatin durch Behandlung mit den hier dargestellten Gold-Peptidkonjugaten gebrochen werden.



tion von Apoptose über die Mitochondrien nahelegen. Interessanterweise konnte die Resistenz von MDA-MB231 Zellen gegen das bekannte Chemotherapeutikum Cisplatin durch Behandlung mit den hier dargestellten Gold-Peptidkonjugaten gebrochen werden.

This work shows a new route to gold-peptide bioconjugates via a non-catalyzed [3+2] cycloaddition reaction of gold azides with alkynyl peptides. Gold(I) tetrapeptide conjugates with a mitochondria-targeting sequence were synthesized and display good antiproliferative potency against selected cancer cells (2 – 50 μ M). The cellular uptake of Au, determined by atomic absorption spectroscopy (AAS), shows that high initial uptake equals strong cytotoxicity. Respiration and acidification rates react immediately upon treatment with the Au-peptide conjugates, and a terminal breakdown of essential cellular functions is complete within ca. 12 h at most, as observed by online monitoring of the cancer cell metabolism in a micro-fluidic biosensor device (Bionas sensorchip system). The mode of action of these Au-peptide bioconjugates was elucidated by a variety of biochemical and cell biological experiments. Ultimately, treatment leads to cell death via apoptotic pathways, as indicated by flow cytometry, low mitochondrial membrane potential (MMP) and DNA fragmentation. Intriguingly, cisplatin-resistance in p53-mutant MDA-MB231 breast cancer cells could be overcome by the Au-peptide conjugates presented herein.

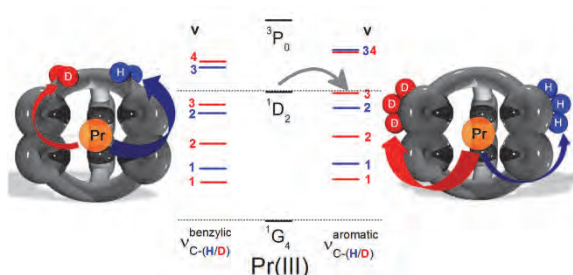
Michael Seitz

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>

J. Scholten, G.A. Rosser, J. Wahsner, N. Alzakhem, C. Bischof, F. Stog, A. Beeby, M. Seitz, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012) 13915-13917. Anomalous Reversal of C–H and C–D Quenching Efficiencies in Luminescent Praseodymium Cryptates.



Near-IR lanthanoid luminescence exhibits a number of favorable, technologically very interesting characteristics. One of the major drawbacks for the use of molecular lanthanoid complexes in solution is the severe sensitivity of lanthanoid excited states towards multiphonon-mediated, non-radiative relaxation processes which are induced by high-frequency

vibrational overtones X–H (with X = O, N, C). These detrimental deactivation channels can usually be reduced by replacement of X–H with oscillators of higher reduced mass (e.g. C–D or C–F). The heavier analogues require more vibrational quanta in order to bridge a given energy gap between a lanthanoid emissive state and the next lower level, which makes deactivation less favorable. It is therefore commonly believed that e.g. deuteration always increases the luminescence efficiency. This assumption, however, neglects the great importance of Franck-Condon overlap (FCO) factors, i.e. the resonance of lanthanoid electronic levels and accepting vibrational overtones, which is especially important for near-IR emitting lanthanoids with small energy gaps. These factors can in principle lead to an increase of non-radiative deactivation upon deuteration. In this paper, we show for the first time that FCO can indeed be the dominating factor leading to decreased luminescence efficiency in deuterated lanthanoid complexes. In addition, we precisely pinpoint the origin of this effect in a molecular lanthanoid cryptate architecture with different oscillator moieties.

Lanthanoiden-Lumineszenz im nahen IR-Bereich zeigt eine Reihe von vorteilhaften, technologisch sehr interessanten Eigenschaften. Einer der Hauptnachteile für die Verwendung von molekularen Lanthanoidkomplexen in Lösung ist die starke Empfindlichkeit der angeregten Lanthanoidzustände gegenüber multiphonon-vermittelten, strahlungslosen Relaxationsprozessen, die durch hochfrequente Vibrationsobertöne X–H (mit X = O, N, C) ausgelöst werden. Diese schädlichen Deaktivierungswege können gewöhnlich verringert werden durch den Austausch von X–H durch Oszillatoren mit höherer reduzierter Masse (z.B. C–D oder C–F). Die schweren Analoga benötigen mehr Vibrationsquanten, um eine gegebene Energielücke zwischen einem emittierenden Lanthanoidzustand und dem nächsttieferen Niveau zu überbrücken, was die Deaktivierung weniger günstig werden lässt. Gemeinhin wird deshalb davon ausgegangen, dass z.B. die Deuterierung die Lumineszenz-Effizienz immer erhöht. Diese Annahme vernachlässigt aber die große Wichtigkeit von Franck-Condon-Überlappfaktoren (FCO), d.h. die Resonanz von elektronischen Lanthanoid-Niveaus und den aufnehmenden Vibrationsobertönen, was besonders wichtig ist für nah-IR-emittierende Lanthanoide mit kleinen Energielücken. Diese Faktoren können im Prinzip auch zu einer Zunahme der strahlungslosen Deaktivierung nach Deuterierung führen. In diesem Artikel zeigen wir erstmals, dass FCO in der Tat ein dominierender Faktor werden kann, der zu verringerter Lumineszenz in deuterierten Lanthanoidkomplexen führt. Darüber hinaus lokalisieren wir den Ursprung dieses Effektes in einer molekularen Lanthanoidcryptat-Architektur mit unterschiedlichen Oszillatoren.

Roland A. Fischer

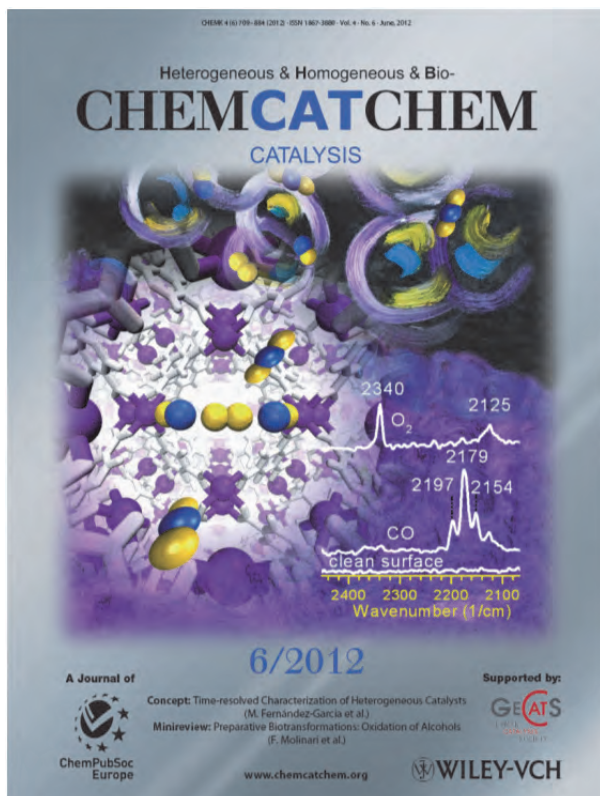
Anorganische Chemie II – Organometallics & Materials Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

H. Noei, S. Amirjalayer, M. Müller, X. N. Zhang, R. Schmid, M. Muhler, R. A. Fischer, Y. M. Wang, *Chemcatchem* **2012**, 4, 755-759. Low-Temperature CO Oxidation over Cu-Based Metal-Organic Frameworks Monitored by using FTIR Spectroscopy.



Low temperature CO oxidation is among the most interesting reactions in heterogeneous catalysis. It is catalyzed by gold nanoparticles supported on metal oxide surfaces (e.g. TiO₂, MgO and ZnO). Cu-based Metal-Organic Frameworks (MOFs) have been identified for similar efficient CO oxidation at ambient pressure and elevated temperatures: [Cu₃btc₂] and [Cu₅(OH)₂(nip)₄(H₂O)₆] (H₂O)_{4.25} (nip = 5-nitroisophthalate) with 100 % conversion at 240 °C and 200 °C, respectively. However, the origin of the catalytic activity of such Cu-MOFs is not well understood. Coordinatively unsaturated metal ion sites (CUS) at the backbone of MOFs are known to play an important role for gas storage, chemical sensing and are also relevant sites for catalysis. In our article we present the results of our collaborative effort on the *in situ* monitoring of the co-adsorption of CO and O₂ at [Cu₃btc₂] (HKUST-1) and the congener [Cu₃btb₂] (MOF-14, btb = benzene-1,3,5-tribenzoate) by using a novel ultrahigh

vacuum infrared spectroscopy tool (UHV-FTIRS). The high-quality IR data provide unambiguous spectroscopic evidence for the surprisingly high catalytic activity of both Cu-MOFs samples for CO oxidation at temperatures as low as 105 K. The activity was assigned to the unsaturated Cu²⁺ sites of these MOFs and their structural proximity.

Die katalytische CO-Oxidation bei niedrigen Temperaturen ist eine bedeutende Reaktion in der Heterogene Katalyse. Gold-Nanopartikel auf Metal-Oxid-Trägern (TiO₂, MgO und ZnO) sind typische Katalysatoren dafür. Gleichwohl bleibt die Herausforderung noch effizientere und billigere Katalystoren zu entwickeln. Cu-basierte, Metal-Organic Frameworks (MOFs) wurden jüngst als effiziente Katalysatoren für die CO-Oxidation bei Normaldruck und erhöhter Temperatur identifiziert: [Cu₃btc₂] und [Cu₅(OH)₂(nip)₄(H₂O)₆] (H₂O)_{4.25} (nip = 5-nitroisophthalate), 100 % Konversion bei 240 °C bzw. 200 °C. Der Ursprung der Aktivität ist bisher ungeklärt. Koordinativ ungesättigte Metall-ionen im Rückgrat der MOFs spielen eine bedeutende Rolle für die Gasspeicherung, Chemische Sensorik und auch in der Katalyse. In unserer Kooperation gelang es durch *in situ* Spektroskopie (UHV-FTIR) der Koadsorption von CO und O₂ an [Cu₃btc₂] (HKUST-1) und dem verwandten [Cu₃btb₂] (MOF-14) die überraschend hohe Aktivität dieser MOFs bei extreme niedrigen Temperaturen von 105 K zu belegen und auf die benachbarten, ungesättigten Cu²⁺-Zentren der MOFs zurückzuführen.

Anjana Devi

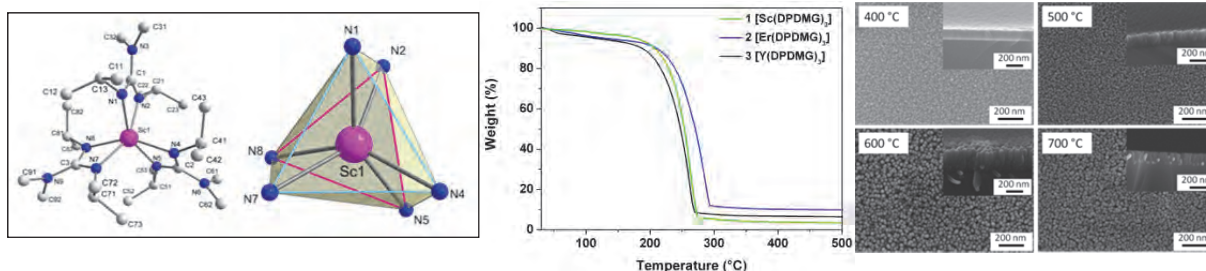
AG Chemie Anorganischer Materialien; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

A. P. Milanov, K. Xu, S. Cwik, H. Parala, T. de los Arcos, H.-W. Becker, D. Rogalla, R. Cross, S. Paul, A. Devi, *Dalton Trans.* **41** (2012) 13936 – 13947. Sc_2O_3 , Er_2O_3 , and Y_2O_3 thin films by MOCVD from volatile guanidinate class of rare-earth precursors

Alternative novel precursor chemistries for the vapor phase deposition of rare-earth (RE) oxide thin films were developed by synthesizing the rare earth homoleptic tris-guanidinate compounds $[\text{Sc}(\text{DPDMG})_3](\mathbf{1})$, $[\text{Er}(\text{DPDMG})_3](\mathbf{2})$ and $[\text{Y}(\text{DPDMG})_3](\mathbf{3})$; (where DPDMG = tris(N,N' -diisopropyl-2-dimethylamido-guanidinate)). The complexes were monomeric as revealed by single crystal XRD, NMR and MS analysis and possess promising thermal properties which include volatility and very good thermal stability under evaporation conditions. Thus they were evaluated as precursors for the growth of Sc_2O_3 , Er_2O_3 and Y_2O_3 thin films, respectively, by metal-organic chemical vapor deposition (MOCVD) in the presence of oxygen. The as-deposited films on Si(100) films crystallized in the cubic phase at temperatures as low as 400°C . The films were stoichiometric and displayed promising electrical properties for their potential use as high dielectric constant (high-k) materials. This study clearly demonstrates that the isotypical all-nitrogen coordinated tris-guanidinate complexes of Sc, Y and Er are excellent precursors for the deposition of binary rare-earth oxide thin films.



Alternative neue Precursoren für die Dampfabcheidung von Seltenerd-Oxid Dünnschichten wurden durch Synthese von Seltenerd- homoleptischen tris-Guanidat-Verbindungen, nämlich $[\text{Sc}(\text{DPDMG})_3](\mathbf{1})$, $[\text{Er}(\text{DPDMG})_3](\mathbf{2})$ und $[\text{Y}(\text{DPDMG})_3](\mathbf{3})$, (DPDMG = tris(N,N' -diisopropyl-2-dimethylamido-guanidinat), entwickelt. Die Komplexe sind monomer, wie durch Einkristall-XRD-, NMR- und MS-Analysen nachgewiesen werden konnte, und thermische Analysen zeigen, dass diese Verbindungen leicht zu verdampfen sind und unter den gewählten Abscheidungsbedingungen eine hohe Stabilität aufweisen. Daher werden die Verbindungen für die metallorganische chemische Dampfabcheidung (MOCVD) verwendet, um die entsprechenden Oxiddünnschichten (Sc_2O_3 , Er_2O_3 und Y_2O_3) abzuscheiden. Die abgeschiedenen Schichten auf Si(100) Schichten kristallisierten in der kubischen Phase bei niedrigen Temperaturen von 400°C . Die Schichten waren stöchiometrisch und zeigten vielversprechende elektronische Eigenschaften für ihre mögliche Verwendung als Materialien mit hoher Permittivität. Die Untersuchung hat klar gezeigt, dass die isotypischen voll-Stickstoff koordinierten tris-Guanidinat Komplexe von Sc, Y und Er hervorragende Precursoren für die Abscheidung von binären Seltenerd-Oxid Dünnschichten sind.

Rochus Schmid

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2; AG Computational Materials Chemistry;

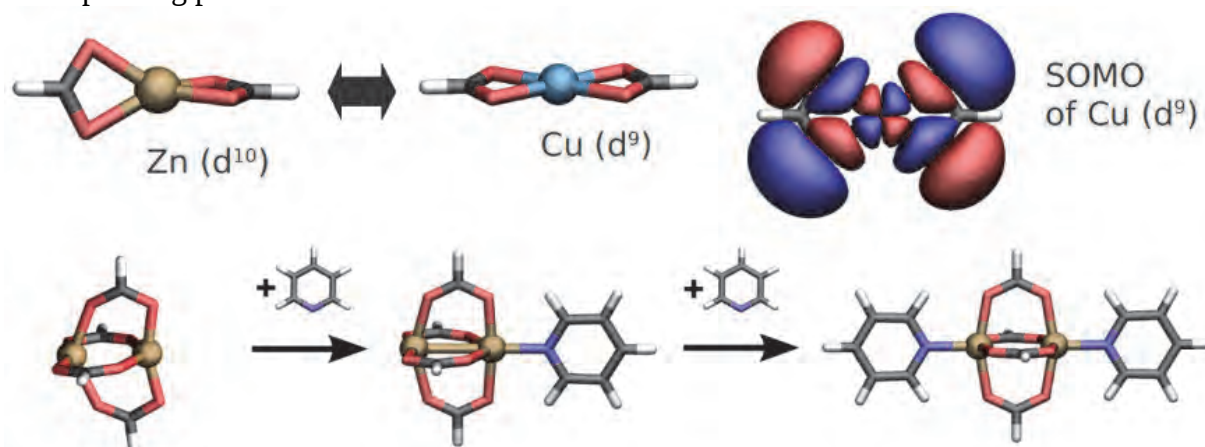
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

S. Bureekaew, S. Amirjalayer, R. Schmid, *J. Mat. Chem.* **115** (2011) 15133-15139. Orbital directing effects in copper and zinc based paddle-wheel metal organic frameworks: the origin of flexibility

So called layer-pillar systems represent a large group of the new porous metal-organic frameworks (MOFs). 2D layers of carboxylate linked „paddle-wheel“ units form a 3D porous network by connecting them with nitrogen donor linkers (pillars) like bipyridine. Interestingly, both zinc and copper based systems exist and they are nearly isostructural. However, the Zn-systems are more soft and flexible. By density functional theory calculations of non-periodic model systems we could clearly reveal orbital directing effects (d^9 Cu(II) centers prefer a square planar conformation) to be the major reason for this. Surprisingly, this difference is directly visible in the structure of the bare vertex model without axial ligands, whereas in the case of pyridine coordination both copper and zinc complexes are structurally nearly indistinguishable. However, in the vibrational normal modes the higher degree of flexibility for the zinc-based systems is still noticeable, explaining the higher flexibility of the corresponding periodic MOFs.



So genannte „layer-pillar“ stellen eine große Gruppe der neuartigen porösen metallorganischen Netzwerke (MOFs) dar. 2D Lagen („layers“) von carboxylat verbrückten „paddle-wheel“ Einheiten bilden dabei ein 3D poröses Netzwerk durch die Verknüpfung mit Stickstoff-Donor Verbindern („pillars“) wie zum Beispiel Bipyridin. Interessanterweise gibt es sowohl Zink- als auch Kupfer-basierte Systeme mit annähernd identischer Struktur. Allerdings weisen die Zink-Systeme eine deutlich höhere Flexibilität auf. Mittels Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen nicht-periodischer Modelle konnten wir klar zeigen, daß orbitalgerichtete Wechselwirkungen (d^9 Cu(II)-Zentren bevorzugen eine quadratisch planare Koordination) hier die entscheidende Ursache sind. Überraschenderweise ist dieser Unterschied im reinen Vertex-Modell (ohne axiale Liganden) direkt erkennbar, wohingegen etwa durch Pyridin-Koordination die Kupfer- und Zink-Komplexe strukturell nicht unterscheidbar sind. In den vibronischen Normalmoden ist die höhere Flexibilität der Zink-Systeme jedoch immer noch deutlich erkennbar, was die größere Flexibilität der entsprechenden periodischen MOFs erklärt.

Radim Beránek

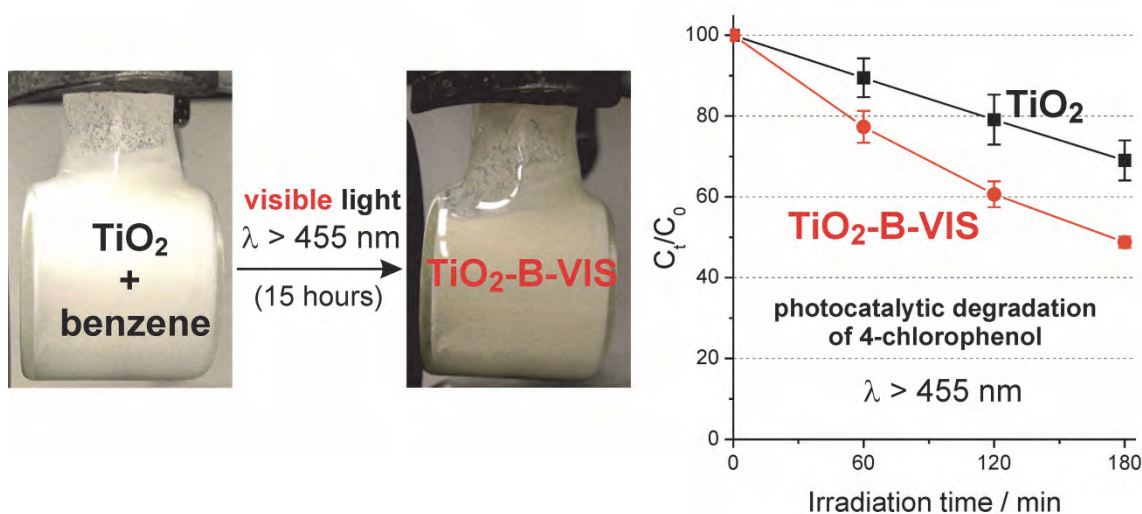
Anorg. Chem. II - Photoactive Materials; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

A. Ramakrishnan, S. Neubert, B. Mei, J. Strunk, L. Wang, M. Bledowski, M. Muhler, R. Beranek, *Chem. Commun.* **48** (2012) 8556-8558. Enhanced performance of surface-modified TiO₂ photocatalysts prepared via a visible-light photosynthetic route

Heterogeneous photocatalysis is known as one of the cheapest and most efficient methods for solar decontamination of water and air from toxic organic pollutants. Moreover, apart from photocatalytic *degradation* reactions, in recent years the great potential of semiconductors like TiO₂ for photocatalytic *synthetic* reactions has been recognized. In this paper we show an interesting example of successful unification of these two concepts. We observed, rather surprisingly, that irradiation of TiO₂ in benzene by *visible* light ($\lambda > 455$ nm) leads to brown coloration of TiO₂, *i.e.*, to formation of carbonaceous polymeric deposits on the titania surface. Moreover, the thus prepared modified TiO₂ was found to be more active in visible light-induced degradation of 4-chlorophenol as a test pollutant than unmodified TiO₂, due to improved surface adsorption properties. Our study thus highlights the importance of surface engineering of photoactive materials and opens up a route for photo-synthesis of further surface-modified photocatalysts.



Die heterogene Halbleiterphotokatalyse ist als eine der günstigsten und effizientesten Methoden bekannt, um organische Schadstoffe aus Wasser und Luft zu entfernen. Darüber hinaus, abgesehen von solchen *Abbaureaktionen*, wurde in den letzten Jahren auch das große Potenzial der Halbleiterphotokatalyse für chemische *Synthesereaktionen* erkannt. In diesem Artikel zeigen wir ein interessantes Beispiel für eine erfolgreiche Vereinigung dieser beiden Konzepte. Überraschenderweise haben wir beobachtet, dass die Bestrahlung von TiO₂ in Benzol mit *sichtbarem* Licht ($\lambda > 455$ nm) zur Braunfärbung von TiO₂ führt, die auf Bildung von kohlenstoffhaltigen polymerartigen Ablagerungen auf der Titandioxidoberfläche zurückzuführen ist. Interessanterweise haben wir auch gefunden, dass das so hergestellte modifizierte TiO₂ aktiver im photokatalytischen Abbau von 4-Chlorphenol (Testschadstoff) als unmodifiziertes TiO₂ ist, was vor allem durch die verbesserten Oberflächenadsorptionseigenschaften erklärt werden konnte. Unsere Studie zeigt die große Bedeutung der Optimierung der Oberflächeneigenschaften von photoaktiven Materialien auf und öffnet den Weg für lichtinduzierte Synthese von weiteren oberflächenmodifizierten Photokatalysatoren.

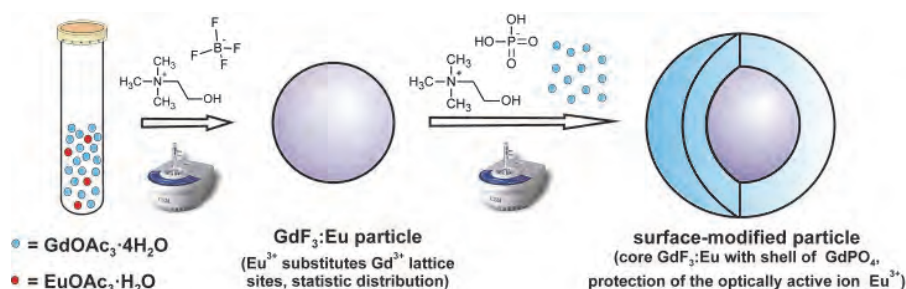
Anja-Verena Mudring

Inorganic Chemistry III – Materials Engineering and Characterization; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3227408; FAX: ++49-(0)234-3214951

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

C. Lorbeer, J. Cybinska, A.-V. Mudring, *J. Mater. Chem.* **22** (2012) 9505-9508. Phosphate protected fluoride nano-phosphors



Energy-efficient nano-phosphors for lighting application allow to save enormous amounts of energy. However, unlike in many other applications taking a phosphor to the nano-

regime is a tightrope walk: On the one hand small particles are most wanted (processing of the phosphor, device manufacturing, device performance, reduced light scattering), on the other hand some property changes occur because of the small particle size that are undesired: The large surface area promotes emission quenching because of surface defects and surface bound water. An easy way to circumvent these problems is shielding the surface by a protective layer. Based on the unique properties of ionic liquids, we developed a fast and facile synthesis protocol to surface coated fluorides (Scheme). In a first step, fluoride nanoparticles are synthesized by microwave treatment of gadolinium and europium acetate hydrate in a tetrafluoroborate ionic liquid like [choline][BF₄]. Here the anion of the ionic liquid serves as the fluoride source. Instead of centrifuging, washing and drying the nanofluoride particles after the reaction, for coating and surface modification it is possible to simply add some additional gadolinium precursor together with a second task-specific ionic liquid containing the anion which is desired for the shell such as [choline][H₂PO₄] (choline = 2-hydroxyethyl trimethylammonium). A protective phosphate shell around the nanofluoride is then obtained by re-heating the reaction mixture in the microwave. The synthesis protocol developed is a quick and easy route to highly luminescent, high-temperature stable nano fluorides benefiting from the combination of microwave synthesis and task-specific ionic liquids. This opens up a completely new dimension for the application of fluoride materials under harsh environmental conditions. The obtained material is of extremely small size (<10 nm) and retains excellent photophysical properties even at high temperatures in humid and oxidizing atmosphere where un-protected lanthanide fluorides would convert to their oxyfluorides.

Die Entwicklung Energie-effizienter Nanophosphore für Beleuchtungsanwendungen würde es erlauben, enorme Mengen Energie zu sparen. Allerdings ist es nicht einfach, Leuchtstoffe auf die Nanoskala zu bringen, ohne dass ihre Effizienz verloren geht. Denn es ist gerade die Partikeloberfläche, die maßgeblich an strahlungslosen Relaxationsprozessen beteiligt ist. Daher gilt es, die Partikeloberfläche mit einer Schutzschicht zu überziehen. Wir haben ein einfaches Mikrowellen-gestütztes Verfahren auf Basis Ionischer Flüssigkeiten entwickelt, das es ermöglicht zunächst die gewünschten Leuchtstoffpartikel aus einer reaktiven Ionischen Flüssigkeit herzustellen und die Partikel dann durch Zugabe einer zweiten reaktiven Ionischen Flüssigkeit mit einer Schutzschicht zu überziehen.

- In 2012, research at RUB BioMIP involved the coordination of 2 EU projects, **ECCell** and **MICREAgents**, one finishing and one just starting, as well as participation in 3 other EU projects, MATCHIT, CADMAD and an EU coordination action COBRA where we are developing a roadmap for the area of ChemBio-IT.
- The EU project Electronic Chemical Cells (**ECCell**, 2008-2012), coordinated by RUB BioMIP, established a new domain of integrated electronic-chemical ICT, by researching and implementing tightly coupled twin-layer electronic and chemical systems with key examples from the domain of autocatalytic chemistry, relevant to the construction of an electronic chemical cell. The Research Unit BioMIP at RUB designed, constructed and tested the electronic chemical microprocessors used in the project. Together with partners from 5 countries (including Israel) these electronic chemical processors were advanced to implement the electronically regulated chemical processes making up the artificial cell: the electrochemistry for metabolism was developed in Israel, the amphiphilic polymer chemistry for sequence specific compartmentalization in the Netherlands, the amplification chemistry at RUB and in Israel, and the mesoscale simulation in Denmark. The amplification system for the ECCell is based on fast disulphide ligation, triplex DNA interactions and electronically switchable pH. A lasting impact of the project will also involve the completed online feedback hardware and software system.
- In the **MICREAgents** project (Microscale Chemically Reactive Electronic Agents), which came top in the competitive ranking of funding in the proactive initiative Unconventional Computing in 2012, we are building microscopic self-assembling chemical laboratories run by CMOS chips.

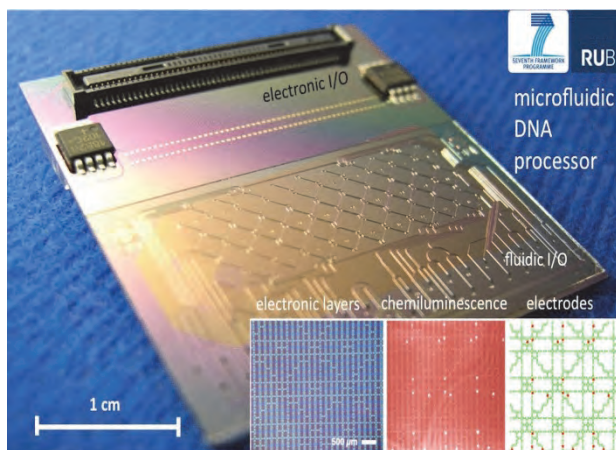


Fig 1: Microfluidic DNA processor.

Chemical microprocessor chips such as the example shown here, developed by the RUB-BioMIP research group, serve as a platform for developing Electronic Chemical Cells and find application in various areas of DNA processing in microscopic chemical containers. The 3 insets show details of the electronic layer, scarcely visible beneath the microfluidics in the main picture (i) showing the multilayer wiring of the "fractal" electrode array (ii) an example of electronically induced chemistry: a chemiluminescent process (iii) the programmably activated (red) electrodes (green).

- Im EU-Projekt **ECCell** wurde von 2008-2012 ein neuer Ansatz für adaptive 'eingebettete' Informationstechnologien der Zukunft auf molekularem Niveau durch die Realisierung erster elektronisch programmierbarer chemischer Zellen erforscht und die Grundlage gelegt für eine kompartimentierte mikro- und nano-skalierbare molekulare Informationsverarbeitung mit einem Paradigmenwechsel hin zu digital programmierbaren chemischen Systemen.

Wolfram Sander

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

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

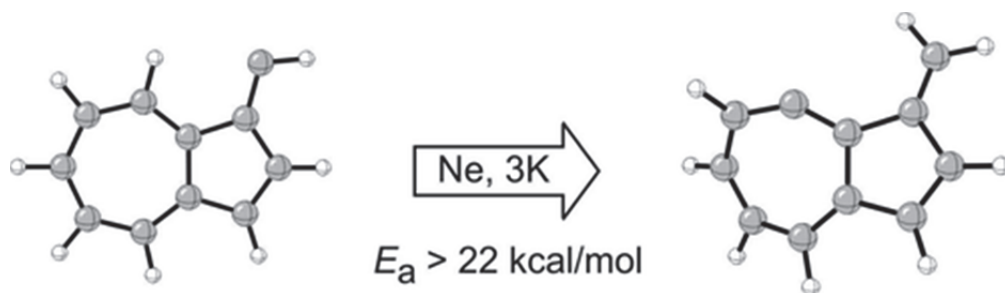
email: wolfram.sander@ruhr-universität-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc2>

S. Henkel, Y. Huynh, P. Neuhaus, M. Winkler, W. Sander, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012) 13204-13207. Tunneling Rearrangement of 1-Azulenylcarbene

Quantenchemisches Tunneln ist ein wichtiger Prozess, der die Reaktionsraten bei Transferreaktionen von Protonen und Wasserstoffatomen, aber auch von größeren („schweren“) Atomen, wie Kohlenstoff, beeinflussen kann. Da die Raten für das Tunneln fast unabhängig von der Temperatur sind, wird das Tunneln bei tiefen Temperaturen geschwindigkeitsbestimmend, wenn klassische thermische Barrieren zu hoch sind. 1-Azulencarben wurde durch Photolyse von 1-Azulenyldiazomethan in Argon- oder Neonmatrix bei 3-10 K hergestellt. Das hoch polare Singulett Carben ist metastabil und lagert sich durch Tunneln um zum 8-Methylen-bicyclo[5.3.0]deca-1,3,5,6,9-pentaen.

Durch Substitution an 4- und 8-Position mit Deuterium kann die Umlagerung komplett verhindert werden. Dies deutet auf einen sehr großen kinetischen Isotopeneffekt hin, wie dies für eine Tunnelreaktion erwartet werden kann.

Diese Tunnelreaktion ist von besonderem Interesse, da es sich um einen der seltenen Fälle handelt, bei dem während der Umlagerung die Symmetrie des Moleküls gebrochen wird, und ein Enantiomerenpaar aus einer achiralen Vorstufe entsteht.



Quantum chemical tunneling is an important process that can influence reaction rates of proton and hydrogen atom transfer, but also of larger (“heavy”) atoms such as carbon. Since tunneling rates are almost independent of temperature, tunneling becomes rate determining at low temperatures, when classical thermal barriers are prohibitively high.

1-Azulenylcarbene was synthesized by photolysis of 1-azulenyldiazomethane in argon or neon matrices at 3–10 K. The highly polar singlet carbene is only metastable and undergoes a tunneling rearrangement to 8-methylene-bicyclo[5.3.0]deca-1,3,5,6,9-pentaene.

After substitution of the 4 and 8 positions with deuterium, the rearrangement is completely inhibited. This indicates a very large kinetic isotope effect, as expected for a tunneling reaction. This tunneling rearrangement is of particular interest since it is one of the rare cases where during the rearrangement the molecular symmetry is broken, and a pair of enantiomers is formed from the achiral precursor.

Karina Morgenstern

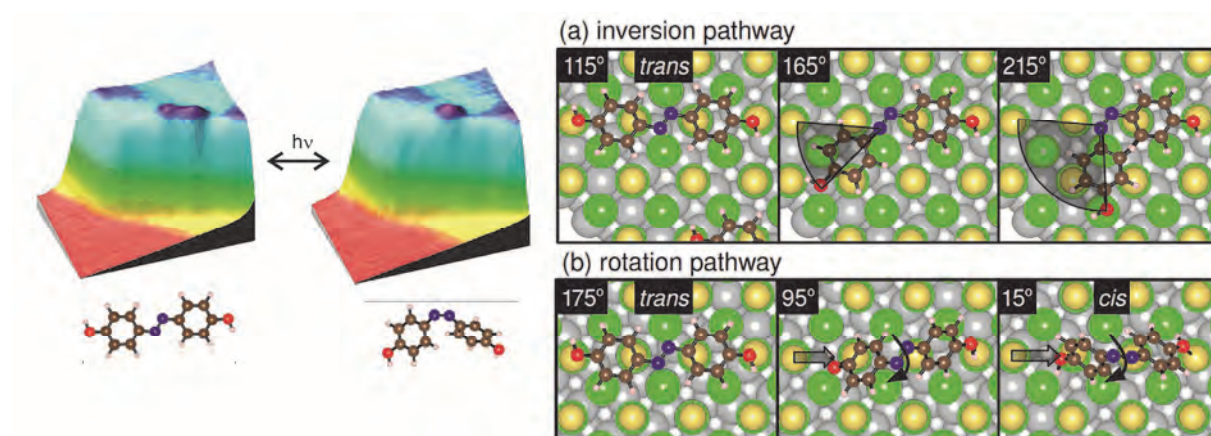
Lehrstuhl für Physikalische Chemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: Karina.Morgenstern@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/pc1>

J. Henzl, P. Puschnig, C. Ambrosch-Draxl, A. Schaate, B. Ufer, P. Behrens, K. Morgenstern, *Phys. Rev. B* **85** (2012) 035410-1 - 035410-5. Photoisomerization for a molecular switch in contact with a surface.

Zukünftige molekulare Nanotechnologie erfordert Moleküle, die einzeln adressiert und verändert werden können. In diesem Zusammenhang sind photochrome Moleküle von besonderer Bedeutung, die mittels Licht zwischen zwei Zuständen geschaltet werden können. Während Azobenzolderivate in der Lösung diese Anforderung erfüllen, ist es nicht a priori offensichtlich, ob diese bei Kontakt mit der Oberflächen nicht Ihre Schalteigenschaften durch elektronische Kopplung, Bindungsbildung oder sterische Restriktionen verlieren. Für Di-hydroxy-Azobenzol auf dünnen NaCl Schichten wurde gezeigt, dass eine reversible Isomerisierung mit UV Licht, aber nicht mit sichtbarem Licht möglich ist. Dieses unerwartete Verhalten wurde durch elektrostatische verursachte sterische Unterdrückung des Inversionsweges erklärt.



Future nanoelectronics demands active elements on a molecular scale to trigger and to control their functionality. Photochromic molecules are highly attractive candidates for this purpose because light can reversibly switch them between two different states. Among photochromic molecules, azobenzene derivatives are extensively studied because of their robust photoisomerization in solution phase. For a potential implementation into real devices, however, the active elements, including the photochromic molecules, have to work under different environments, especially in contact with a surface. This contact with a surface is expected to alter the photoisomerization properties substantially, e.g., by bond formation, steric hindrance, or electronic quenching. The photoisomerization properties of di-hydroxy-azobenzene on a thin insulating NaCl layer on Ag(111) are investigated with a low-temperature scanning tunneling microscope and density functional calculations. Illumination with UV light at 365 nm induces the reversible direct isomerization of the adsorbed species, while visible light does not lead to any changes. This unexpected behavior is rationalized in terms of electrostatic interactions caused by the atomistic details of the surface.

Christian Herrmann

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

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

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

A. Syguda, M. Bauer, U. Benscheid, N. Ostler, E. Naschberger, S. Ince, M. Stürzl, C. Herrmann, *FEBS J.* **279** (2012) 2544-2554. Tetramerisation of human guanylate binding protein 1 is mediated by coiled coil formation of the C-terminal α -helices

Als Mitglied der Dynamin-Familie neigt das humane Guanylat-bindende Protein 1 (hGBP1) zur Nukleotid-abhängigen Selbstassemblierung, ein Prozess der bei Dynamin zur GTP-Hydrolyse getriebenen Abschnürung von Membranvesikeln führt. Wir konnten mit Hilfe molekularbiologischer und biochemischer Experimente Kontakte zwischen bestimmten Domänen des hGBP1 identifizieren, von denen einer zur Dimer- und ein bestimmter anderer zur Tetramer-Bildung führt. GTP-Bindung einerseits und -Hydrolyse andererseits sind für die Sukzessivität dieser Prozesse verantwortlich. Mit Hilfe biophysikalischer Methoden konnten

wir auch damit einher gehende Strukturänderungen nachweisen und die Affinität zwischen den einzelnen Subdomänen des hGBP1 quantifizieren. Darüber hinaus ist es auch gelungen, die nukleotidabhängige Tetramerbildung in lebenden Zellen zu zeigen.

The human guanylate binding protein 1 (hGBP1) is a large GTP binding protein belonging to the dynamin family a common feature of which is nucleotide dependent assembly to homotypic oligomers. Assembly leads to stimulation of GTPase activity which in the case of dynamin is responsible for scission of vesicles from membranes. By yeast two hybrid and biochemical experiments we address intermolecular interactions between all subdomains of hGBP1 and identify the C-terminal subdomain, α 12/13, as a new interaction site for self-assembly. In addition to contacts between GTPase



domains, leading to dimer formation, the interaction between two α 12/13 subdomains in the course of GTP hydrolysis, results in tetramer formation of the protein (see scheme above). With the help of circular dichroism spectroscopy we can show coiled coil formation of two α 12/13 subdomains and concentration dependent measurements allow estimating a value for the dissociation constant of 7.3 μ M. We suggest GTP hydrolysis driven release of the α 12/13 subdomain making it available for coiled coil formation. Furthermore, we can demonstrate the biological relevance of hGBP1 tetramer formation in living cells by chemical crosslink experiments.

Martina Havenith

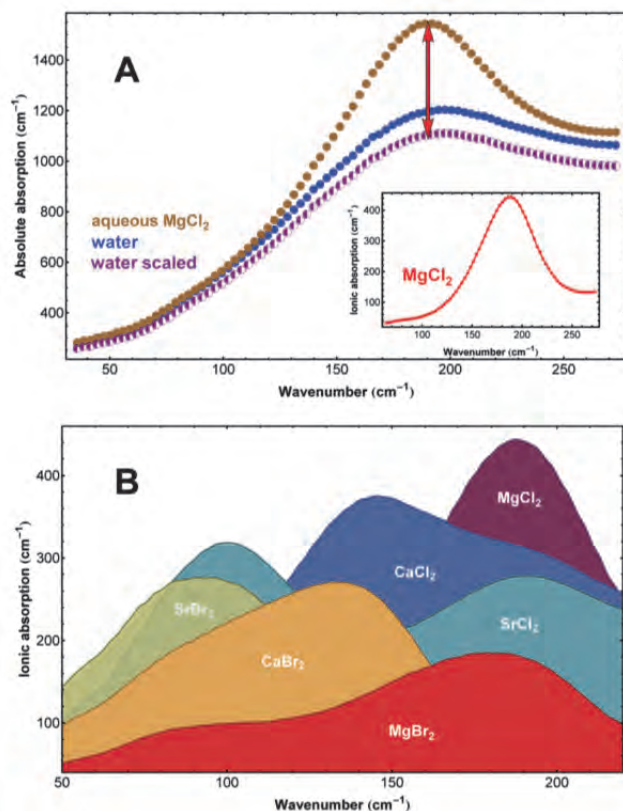
Physikalische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

S. Funkner, G. Niehues, D.A. Schmidt, M. Heyden, G. Schwaab, K.M. Callahan, D.J. Tobias, M. Havenith, *J. Amer. Chem. Soc.*, **134** (2012) 1030-1035. Watching the low frequency motions in aqueous salt solutions – the terahertz vibrational signatures of hydrated ions.

Ein vertieftes Verständnis der Solvatation von Ionen in wässriger Lösung hat Bedeutung für



eine Vielzahl bisher ungelöster Fragestellungen in Chemie und Biologie. Das Konzept der „Verstärkung“ (structure making) bzw. „Schwächung“ (structure breaking) von Wasserstoffbrückenbindungen durch Ionen wird häufig herangezogen, um z.B. die Hofmeister-Serie zu rationalisieren, die vor mehr als 100 Jahren entdeckt wurde. Diese ist immer noch die Basis für die Interpretation einer Vielzahl experimenteller Beobachtungen, insbesondere der Stabilisierung und Destabilisierung von Biomolekülen. Neuere Studien mit modernen experimentellen Methoden und Hochleistungs-Molekulardynamik-simulationen liefern vor allem bezüglich der Reichweite des Effekts widersprüchliche Ergebnisse zum “structure maker/breaker” Konzept. In unserer Veröffentlichung beschreiben wir eine systematische Terahertz-Absorptions- und Molekulardynamik-studie einer Reihe wässriger Lösungen

divalenter Salze. Die Konzentrationsabhängigkeit und die Zuordnung von Absorptionsbanden liefert ein Bild kurzreichweitiger Einflüsse der Ionen, die sich auf die erste Solvathülle beschränken.

The details of ion hydration still raise fundamental questions relevant to a large variety of problems in chemistry and biology. The concept of water “structure breaking” and “structure making” by ions in aqueous solutions has been invoked to explain the Hofmeister series introduced over 100 years ago, which still provides the basis for the interpretation of experimental observations, in particular the stabilization/destabilization of biomolecules. Recent studies, using state-of-the-art experiments and molecular dynamics simulations, either challenge or support some key points of the structure maker/breaker concept, specifically regarding long-ranged ordering/disordering effects. In our paper, we report a systematic terahertz absorption spectroscopy and molecular dynamics simulation study of a series of aqueous solutions of divalent salts, which adds a new piece to the puzzle. The picture that emerges from the concentration dependence and assignment of the observed absorption features is one of a limited range of ion effects that is confined to the first solvation shell.

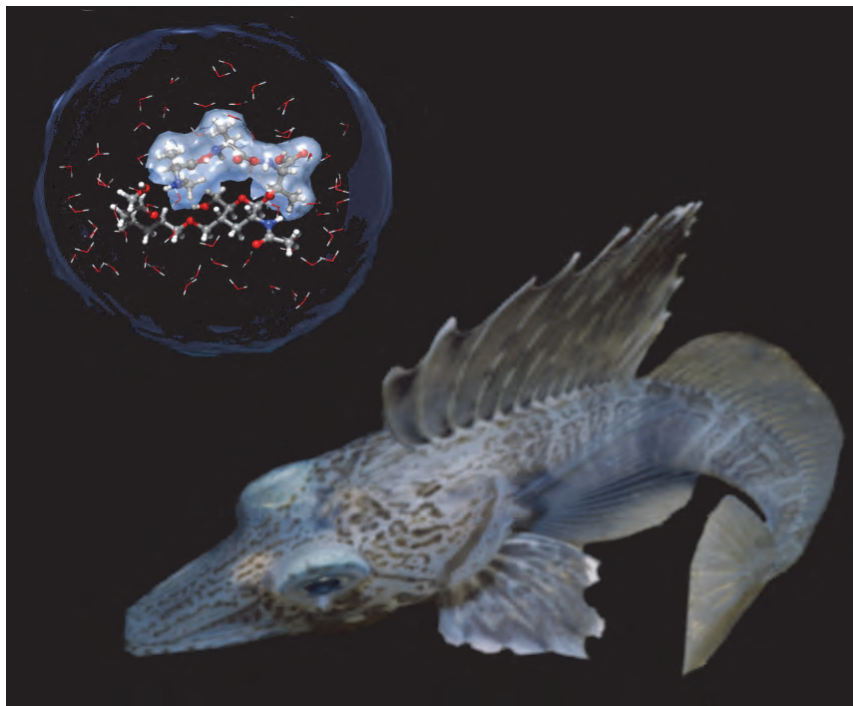
Simon Ebbinghaus

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

Tel.: ++49-(0)234-3225533; FAX: ++49-(0)234-3214183

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

S. Ebbinghaus, K. Meister, M. B. Prigozhin, A. L. DeVries, M. Havenith, J. Dzubiella M. Gruebele, *Biophys. J.* **103** (2012) 20-22. Functional Importance of Short-Range Binding and Long-Range Solvent Interactions in Helical Antifreeze Peptides



Short-range ice binding and long-range solvent perturbation both have been implicated in the activity of antifreeze proteins and antifreeze glycoproteins. We study these two mechanisms for activity of winter flounder antifreeze peptide. Four mutants are characterized by freezing point hysteresis (activity), circular dichroism (secondary structure), Förster resonance energy transfer (end-to-end rigidity), molecular dynamics simulation (structure), and terahertz spectroscopy (long-range solvent perturbation). Our results show that the short-range model is sufficient to explain the activity of our mutants, but the long-range model provides a necessary condition for activity: the most active peptides in our data set all have an extended dynamical hydration shell. It appears that antifreeze proteins and antifreeze glycoproteins have reached different evolutionary solutions to the antifreeze problem, utilizing either a few precisely positioned OH groups or a large quantity of OH groups for ice binding, assisted by long-range solvent perturbation.

Our results show that the short-range model is sufficient to explain the activity of our mutants, but the long-range model provides a necessary condition for activity: the most active peptides in our data set all have an extended dynamical hydration shell. It appears that antifreeze proteins and antifreeze glycoproteins have reached different evolutionary solutions to the antifreeze problem, utilizing either a few precisely positioned OH groups or a large quantity of OH groups for ice binding, assisted by long-range solvent perturbation.

Die Effekte der langreichweitigen und kurzreichweitigen Beeinflussung des Wassers spielen eine große Rolle bei der Aktivität von Antifreeze Proteinen und Antifreeze Glycoproteinen. In einer systematischen Studie von vier Mutanten des helikalen wf-AFP1 durch verschiedene biophysikalische Techniken (Hysterese (Aktivität), Circular Dichroismus (Sekundärstruktur), Förster Resonanz Energie Transfer (Helix Rigidität), Molekular Dynamik Simulation (Struktur), und Terahertz Spektroskopie (langreichweitige Beeinflussung des Lösungsmittel)) untersuchen wir die Beiträge der beiden Mechanismen zur Antifreeze Aktivität. Die aktivsten der Mutanten zeigen auch die langreichweitigste Beeinflussung des Wassers. Die untersuchten Antifreeze Mutanten erlangen ihre Aktivität durch präzise angeordnete repetitive Aminosäuresequenzen.

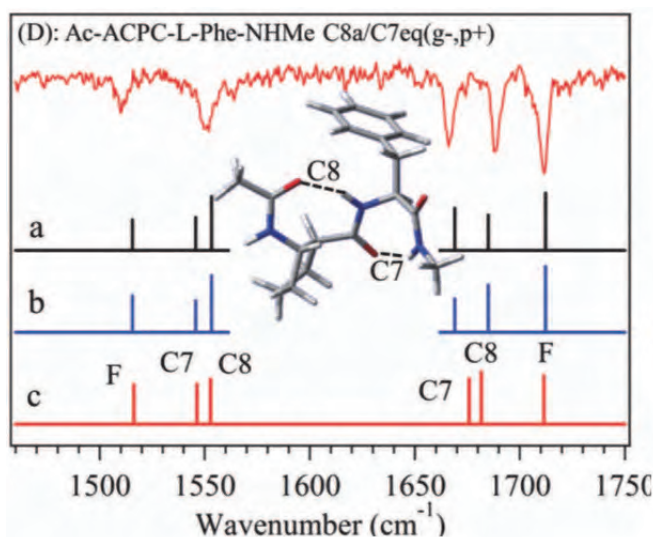
Christian W. Müller

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

Tel.: ++49-(0)234-32-24237; FAX: ++49-(0)234-32-14183

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

E.G. Buchanan, W.H. James III, S.H. Choi, L. Guo, S.H. Gellman, C.W. Müller, T.S. Zwier, *J. Chem. Phys.* **137** (2012) 094301-1–16. Single-conformation infrared spectra of model peptides in the amide I and amide II regions: Experiment-based determination of local mode frequencies and inter-mode coupling



For more than 60 years, the amide I (C=O stretch) region of the amide group's infrared signature has served as a highly diagnostic probe of secondary structure in polypeptides and proteins. Numerous theoretical models aiming at the extraction of conformational structure information from amide I infrared spectra have been developed within a purely electrostatic framework.

On the experimental side, single-conformation infrared spectroscopy in a molecular beam allows to test the ingredients of these models: the local mode frequencies and coupling constants. Motivated

by this need for direct tests, we recorded *single-conformation infrared spectra* in the amide I and amide II (NH bend+CN stretch) regions for a total of 34 conformations of three α -peptides, three β -peptides, four α/β -peptides, and one γ -peptide. The analysis of these spectra revealed that the local mode frequencies in both regions are dictated by a combination of the direct H-bonding environment and indirect, “backside” H-bonds to the same amide group. More importantly, the sign and magnitude of the inter-amide coupling constants in both the amide I and amide II regions were shown to be characteristic of the size of the H-bonded ring linking the two amide groups. These findings provide a unifying picture for future attempts to base the calculation of both nearest-neighbor and next-nearest-neighbor coupling constants on a joint footing.

Mehr als 60 Jahre nach dem ersten quantitativen Deutungsversuch des Zusammenhangs zwischen der Sekundärstruktur von Polypeptiden und ihrer IR-Spektren im C=O Streckschwingungsbereich, sind gegenwärtige theoretische Modelle nach wie vor auf Peptide beschränkt, die aus natürlich vorkommenden α -Aminosäuren zusammengesetzt sind. Diese Beschränkung ist dem Umstand geschuldet, dass die kurzreichweitigen Beiträge direkt benachbarter Amid-Gruppen auf die lokale Frequenz ihrer Nachbarn und die Kopplung mit ihnen einer quantitativen analytischen Darstellung trotzen.

Experimentell gestattet die IR-Einzelkonformationsspektroskopie im Molekülstrahl die detaillierte Überprüfung der Komponenten dieser elektrostatischen Modelle. Unsere Analyse der konformationsspezifischen IR-Spektren von 34 Konformeren sowohl von α -Peptiden als auch von β -, α/β - und γ -Peptiden zeigt, dass sowohl die lokalen Frequenzen als auch die Amid-I/I- und Amid-II/II-Kopplungskonstanten in charakteristischer Weise von der Größe des N-H...O=C Ringes abhängen, der zwei Amid-Gruppen miteinander verknüpft. Dieser überraschende Befund bietet die Grundlage für eine künftige einheitliche Behandlung der IR-Spektren im Amid-I- und Amid-II-Bereich von Peptiden, die sowohl natürlich vorkommende α -Aminosäuren als auch synthetische β - und γ -Aminosäuren enthalten.

Hermann Weingärtner

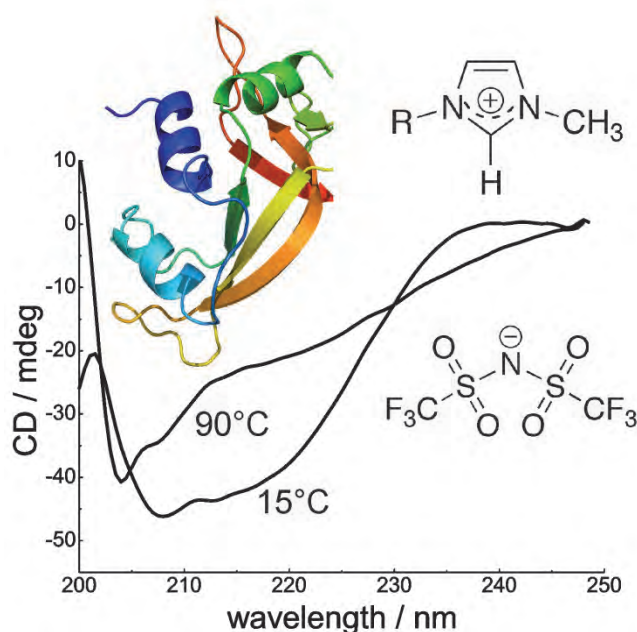
Phys. Chem. II – Physikalische Chemie der Flüssigkeiten; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

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

email: hermann.weingaertner@rub.de

H. Weingärtner, C. Cabrele, C. Herrmann, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 415– 426.
How Ionic Liquids can help to stabilize native proteins.

The native state of a globular protein is essential for its biocatalytic function, but is marginally stable against unfolding. While unfolding equilibria are often reversible, folding intermediates and misfolds can promote irreversible protein aggregation into amorphous precipitates or highly ordered amyloid states. Addition of ionic liquids – low-melting organic salts – offers intriguing prospects for stabilizing native proteins and their enzymatic function against these deactivating reaction channels. The huge number of cations and anions that form ionic liquids allows fine-tuning of their solvent properties, which offers robust and efficient strategies for solvent optimization. This article aims at discussing principles for a rational design of ionic liquid-based formulations in protein chemistry and biocatalysis.



Der native Zustand eines globularen Proteins ist essentiell für seine biokatalytische Funktion, weist aber nur eine geringe Stabilität gegenüber seiner Entfaltung auf. Während Entfaltungsgleichgewichte oft reversibel sind, können Faltungsintermediate und Missfaltungen irreversible Aggregation zu amorphen Präzipitaten oder hochgeordneten amyloiden Zuständen begünstigen. Die Zugabe Ionischer Flüssigkeiten – niedrig schmelzender organischer Salze – eröffnet interessante Möglichkeiten, native Proteine und ihre enzymatische Funktion gegen diese deaktivierenden Reaktionskanäle zu stabilisieren. Die große Anzahl möglicher Kationen und Anionen erlaubt eine systematische Variation der Eigenschaften, die effiziente Strategien zu einer Optimierung der Lösungsmitelegenschaften liefern. Der Artikel diskutiert Prinzipien für eine rationale Optimierung der Ionischen Flüssigkeiten für Anwendungen in der Proteinchemie und Biokatalyse.

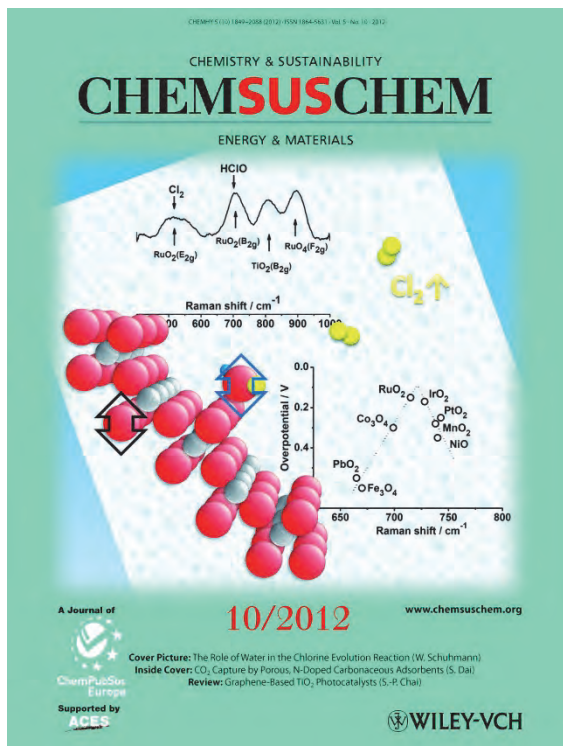
Wolfgang Schuhmann

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

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

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

A. R. Zeradjanin, N. Menzel, P. Strasser, W. Schuhmann, *ChemSusChem* 5 (2012) 1897-1904. The role of water in the chlorine evolution reaction at RuO₂ based electrodes – understanding electrocatalysis as a resonance phenomena



The reaction path of the Cl₂ evolution reaction (CER) was investigated by combining electrochemical and spectroscopic methods. It is shown that oxidation and reconstruction of the catalyst surface during CER is a consequence of the interaction between RuO₂ and water. The state of the RuO₂ surface during the electrochemical reaction was analysed *in situ* using Raman spectroscopy monitoring vibrations of the crystal lattice of RuO₂ and changes in the surface concentration of the adsorbed species as a function of the electrode potential. The role of the solvent was recognized as being crucial in the formation of an oxygen-containing hydrophilic layer, which is a key prerequisite for electrocatalytic Cl₂ formation. Water (more precisely the OH adlayer) is understood not just as a medium that allows adsorption of intermediates, but also as an integral part of the intermediate formed during the electrochemical reaction. New insights in the general understanding of electrocatalysis were obtained utilizing the vibration frequencies of the crystal lattice as a dynamic catalytic descriptor instead of thermodynamic descriptors such as the adsorption energy of intermediates. Interpretation of the derived “volcano”-curve suggests that electrocatalysis is governed by a resonance phenomenon.

talysis were obtained utilizing the vibration frequencies of the crystal lattice as a dynamic catalytic descriptor instead of thermodynamic descriptors such as the adsorption energy of intermediates. Interpretation of the derived “volcano”-curve suggests that electrocatalysis is governed by a resonance phenomenon.

Der Reaktionsweg der Cl₂-Entwicklungsreaktion (Cl₂ evolution reaction; CER) wurde durch die Kombination von elektrochemischen und spektroskopischen Methoden untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass die Oxidation und Rekonstruktion der Katalysatoroberfläche während der CER eine Folge der Reaktion zwischen RuO₂ und Wasser ist. Der Zustand der RuO₂ Oberfläche während der elektrochemischen Reaktion wurde *in situ* mittels Ramanspektroskopie untersucht, wobei die Schwingungen der Kristallstruktur des RuO₂ und Veränderungen der Oberflächenkonzentration der adsorbierten Spezies als Funktion des Elektrodenpotentials evaluiert wurden. Es wurde deutlich, dass die Rolle des Lösungsmittels wesentlich für die Bildung einer Sauerstoff-enthaltenden, hydrophilen Schicht ist, die eine wesentliche Voraussetzung für die elektrokatalytische Cl₂-Bildung ist. Wasser, präziser die OH-Adsorptionsschicht, ist nicht nur ein Medium, das die Adsorption des Intermediates ermöglicht, sondern sie ist selbst integraler Teil des Intermediats, das während der elektrochemischen Reaktion gebildet wird. Neue Einblicke in das grundsätzliche Verständnis der Elektrokatalyse wurden erhalten, indem die Schwingungsfrequenzen des Kristallgitters als dynamischer katalytischer Deskriptor anstatt thermodynamischer Deskriptoren wie der Adsorptionsenergie der Intermediate vorgeschlagen wurde. Die Interpretation der daraus abgeleiteten „Vulkankurven“ legt nahe, dass Elektrokatalyse von einem Resonanzphänomen bestimmt wird.

Axel Rosenhahn

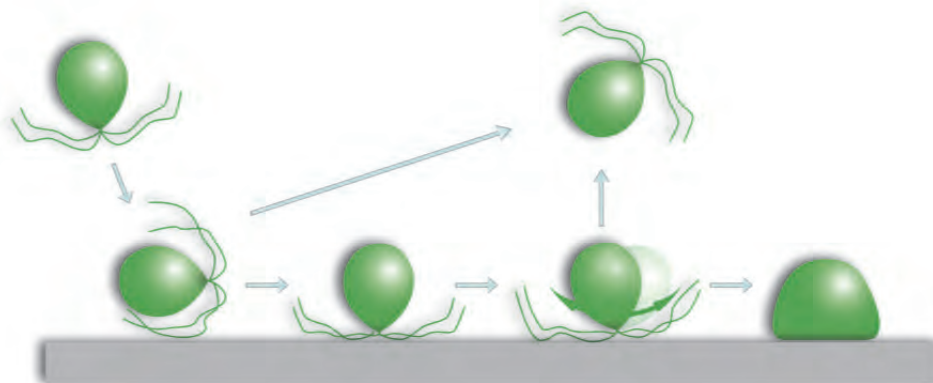
Anal. Chem. - Biogrenzflächen; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224200; FAX: ++49-(0)234-3214420

email: axel.rosenhahn@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/biointerfaces>

A. Rosenhahn, G.H. Sendra, *Biointerphases* 7, (2012) 63. Surface sensing and settlement strategies of marine biofouling organisms

Settlement of the planktonic dispersal stages of marine organisms is the crucial step for the development of marine biofouling. Four-dimensional holographic tracking reveals the mechanism by which algal spores select surfaces suitable for colonization. Quantitative analysis of the three-dimensional swimming trajectories of motile spores of a green macroalga (*Ulva linza*) in the vicinity of surfaces functionalized with different chemistries reveals that their search strategy and swimming behavior is correlated to the number of settled spores found in spore settlement bioassays conducted over 45 min. The spore motility and exploration behavior can be classified into different motion patterns, with their relative occurrence changing with the surface chemistry. Based on the detailed motility analysis we derived a model for the surface selection and settlement process of *Ulva* zoospores. It turns out that spores use a surprisingly sophisticated spinning mechanism to probe the stickiness of a surface. Only surfaces that provide a sufficient adhesion are selected for growth of the green algae. In other words, spores can be viewed as microscopic surface sensors capable of probing surface properties.



Das Besiedeln von Oberflächen ist ein zentraler Schritt im Lebenszyklus vieler biofilmbildender, planktonischer Mikroorganismen. Vierdimensionale, holographische Trajektorienmessung entschlüsselte den Mechanismus durch den Algensporen Oberflächen selektieren, die für eine Besiedlung geeignet sind. Eine quantitative Analyse der zeitaufgelösten, dreidimensionalen Trajektorien zeigt, dass sowohl Dauer, als auch das Auftreten bestimmter Schwimmuster durch die Oberflächenchemie gesteuert werden. Auf Basis der detaillierten Motilitätsanalyse konnte ein Modell für den Oberflächenselektions- und Besiedlungsprozess erstellt werden. Die mikroskopisch kleinen Sporen verwenden einen erstaunlich entwickelten Kreiselmechanismus mit dem sie in der Lage sind, die Haftstärken auf unterschiedlichen Oberflächen zu unterscheiden. Nur solche Grenzflächen, die eine genügend starke Adhäsion gewährleisten werden schließlich besiedelt. Damit können Algensporen als autonome, mikroskopisch kleine Oberflächensensoren angesehen werden.

William S. Sheldrick

Analytische Chemie – Analytische Biokoordinationschemie & Strukturchemie

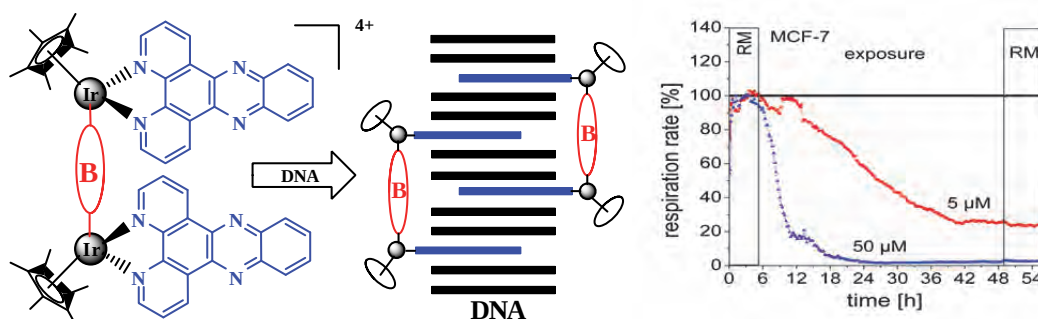
Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

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

<http://homepage.ruhr-uni-bochum.de/william.sheldrick/>

M. A. Nazif, R. Rubbiani, H. Alborzinia, I. Kitanovic, S. Wölfl, I. Ott, W. S. Sheldrick, *Dalton Trans.* **41** (2012) 5587-5598. Cytotoxicity and cellular impact of dinuclear organo-iridium DNA intercalators and nucleases with long bridging ligands.

Die Antitumor-Aktivität von Interkalatoren wie Daunorubicin wird durch ihre starke DNA-Wechselwirkung und ihre langen Verweilzeiten an einzelnen Bindungsstellen bedingt. Um sowohl die Affinität als auch die Spezifität ihrer DNA-Interkalation zu verbessern, haben wir die zwei cytotoxischen Organoiridium(III)-Fragmente in $[\{(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{Ir}(\text{dppz})\}_2(\mu\text{-B})](\text{CF}_3\text{SO}_3)_4$ durch starre Dipyridinyl-Liganden B verbrückt, die eine langsame Dissoziationskinetik weg von der DNA begünstigen sollen. Im Beisein von mittellangen Brückenliganden mit einer Länge von etwa 13.2 Å wird lediglich Mono-Interkalation beobachtet. Dagegen ermöglichen B-Liganden der Längen 10.2 und 20.6 Å eine starke Bis-Interkalation mit jeweils 2 bzw. 5 umklammerten Chromophoren. Trotz ihrer deutlich schwächeren DNA-Wechselwirkung weisen die Mono-Interkalatoren überraschenderweise eine wesentlich höhere Cytotoxizität gegenüber MCF-7 Brustkarzinoma-Zellen ($\text{IC}_{50} = 0.5, 0.6 \mu\text{M}$) im Vergleich zu den Bis-Interkalatoren ($\text{IC}_{50} = 2.2, 3.5 \mu\text{M}$) auf, vermutlich aufgrund ihrer Nuklease-Aktivität.



Antitumour activity of intercalators such as daunorubicin is associated with strong DNA binding and long drug residence times at individual sites. To enhance both the affinity and the specificity of their DNA interactions, we have linked two cytotoxic organo-iridium(III) fragments in the complexes $[\{(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{Ir}(\text{dppz})\}_2(\mu\text{-B})](\text{CF}_3\text{SO}_3)_4$ through rigid dipyridinyl ligands B, that should favour slow dissociation kinetics. Whereas only mono-intercalation was observed in the presence of bridging ligands of intermediate length of about 13.2 Å, B ligands providing intramolecular Ir...Ir distances of 10.2 or 20.6 Å support strong bis-intercalation, involving the sandwiching of respectively 2 or 5 chromophores. Despite their weaker DNA binding, the mono-intercalating complexes are surprisingly significantly more cytotoxic towards MCF-7 breast cancer cells ($\text{IC}_{50} = 0.5, 0.6 \mu\text{M}$) than their bis-intercalating counterparts, presumably due to their invoking pronounced DNA cleavage in the dark.

Dirk Wolters

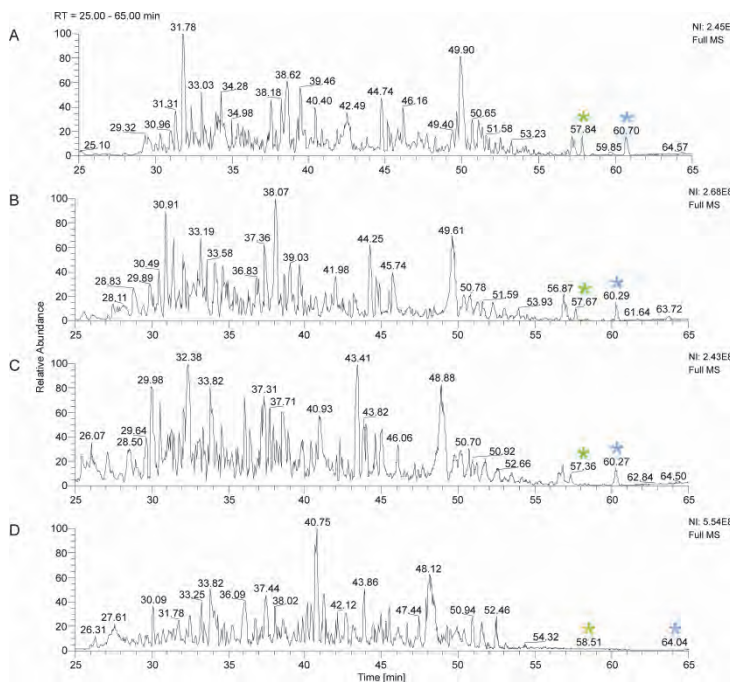
Analytische Chemie – Biomolekulare Massenspektrometrie;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: Dirk.Wolters@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/bioms>

M. Wotske, Y. Wu, D.A. Wolters, *Anal Chem*, (2012) **15**, 6848-55, Liquid chromatographic analysis and mass spectrometric identification of farnesylated peptides

Farnesylierung ist eine Lipidmodifikation, die aus 15 Kohlenstoffatomen besteht und an den C-Terminus eines Proteins angeheftet wird. Kleine GTPasen, die zu der Ras Superfamilie gehören, werden farnesyliert, um an der Zellmembran verankert zu werden. Diese kleinen GTPasen sind als Onkoproteine bekannt und die Lokalisation ist entscheidend für die



Transduktion von extrazellulären Signalen. Farnesyltransferase Inhibitoren sind deswegen als Chemotherapeutika in Diskussion. Farnesylierte Peptide, die nach einem Proteinverdau entstehen können, sind selten mittels massenspektrometrischen Methoden in Kombination mit HPLC untersucht worden. Wir haben zeigen können, dass farnesylierte Peptide sehr gut aus komplexen Zelllysaten nachgewiesen werden konnten, da sie deutlich später als alle anderen Peptide eluieren. Das Chromatogramm zeigt das Peptid Rab1B-CVIM (Stern) in Anwesenheit von steigenden Konzentrationen eines HeLa Zelllysates. Mit dieser Methode lässt sich der

Effekt von Farnesyltransferase Inhibitoren als potentielle Drugs auf farnesylierte Peptide ohne vorangegangene Anreicherungsmethoden analysieren.

Farnesylation involves the post-translational attachment of a 15-carbon unit to the C-terminus of proteins, thus allowing them to incorporate into membranes. The farnesylation reaction requires farnesyl diphosphate as the farnesyl group donor and is catalyzed by the farnesyltransferase. Some of the most familiar farnesylated proteins belong to the Ras protein superfamily, well-known oncoproteins. As Ras proteins require the membrane localization for the transduction of extracellular signals, farnesyltransferase inhibitors are discussed as chemotherapeutic agents. Despite the importance of this post-translational modification, farnesylated peptides have been investigated rarely by means of high pressure liquid chromatography in combination with mass spectrometry. In this study, we examined the liquid chromatographic separation of farnesylated peptides with the help of the multidimensional protein identification technology. The peptides were further ionized by electrospray ionization and subsequently analyzed by tandem mass spectrometry. We demonstrated that farnesylated peptides are more strongly retained by reversed phase than non-farnesylated peptides. This allowed for the identification of farnesylated peptides. In some cases the farnesyl group was apparently split off from the peptide during the ionization process and tandem mass spectra often revealed a neutral loss of the farnesyl moiety.

Nicolas Plumeré

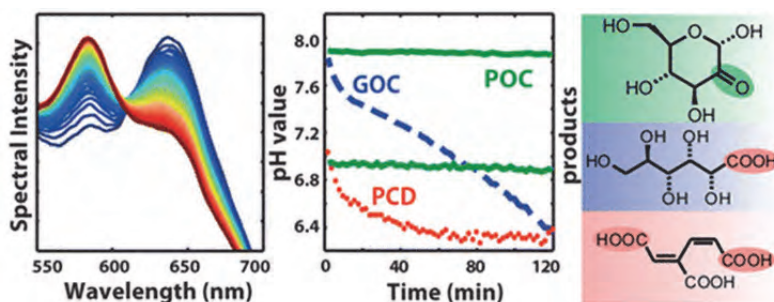
Analytische Chemie – Center for Electrochemical Sciences - CES;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3229434; FAX: ++49-(0)234- 32 14420

email: nicolas.plumere@rub.de

M. Swoboda, J. Henig, H.-M. Cheng, D. Brugger, D. Haltrich, N. Plumeré, M. Schlierf, *ACS Nano* **6**(7) (2012) 6364-6369. Enzymatic oxygen scavenging for photostability without pH drop in single-molecule experiments.



Various electroanalytical and single-molecule fluorescence experiments require strict anaerobic conditions. Oxygen scavenger are used for field applications or for measurements in low volume cells. The most common oxygen scavengers are based

on glucose oxidase (GOC) or protococatechuate dioxygenase (PCD). One of the pitfalls of these systems, however, is the production of carboxylic acids. We demonstrate with SNARF-1, a fluorescent pH sensor, that these acids can result in a significant pH drop over the course of experiments even in presence of significant buffer strengths. Thus, the pH values, which is a critical parameter in electro-chemical or fluorescence experiments, is not well defined when these oxygen scavengers are used. We therefore developped a new oxygen scavenger to achieve pH-stable conditions at arbitrary buffer strength. Our approach is based on glucose, pyranose oxidase and catalase (POC). The reaction of glucose with oxygen when catalyzed by pyranose oxidase produce an inert ketone. This product does not interfere with biomolecules and is pH neutral. We show in single-molecule fluorescence experiments that POC performs as good as the common oxygen-scavenging systems, but offers long-term pH stability and more freedom in buffer conditions. This enhanced stability allows the observation of bionanotechnological assemblies in aqueous environments under well-defined conditions for an extended time.

Verschiedene elektroanalytische und „single molecule“ Fluoreszenz Experimente erfordern strenge anaerobische Bedingungen. Sauerstofffänger werden in Feldanwendungen und bei experimentellen Aufbauten mit kleinen Volumina verwendet. Die am besten etablierten Systeme basieren auf Glucoseoxidase oder Protocatechuate Dioxygenase. Die Carbonsäuren, die die Endprodukte dieser Reaktionen sind, sind gleichzeitig auch der limitierende Faktor dieser experimentellen Vorgehensweise. Mit SNARF-1, einem Fluoreszenz-pH-Sensor, wurde demonstriert, dass diese Säuren zu einem signifikanten Abfall des pH-Wertes während der Experimente führten, was auch nicht durch die Verwendung von starken Puffersystemen abgefangen werden konnte. Wir entwickelten eine neue Methode basiert auf einem System aus Pyranose Oxidase und Katalase (POC), bei dem aus Glucose und Sauerstoff eine katalysierte Reaktion abläuft, deren Endprodukt ein inertes Keton ist. Die verwendeten Enzyme und das Keton als Endprodukt interferieren weder mit anderen Biomolekülen noch haben sie Auswirkungen auf den pH-Wert. In „single molecule“ Fluoreszenz Experimenten konnte gezeigt werden, dass POC gleichwertige Eigenschaften als Sauerstofffänger hat wie die etablierten Systeme, aber eine bessere pH-Wert-Langzeitstabilität aufweist und eine größere Freiheit in der Wahl des Puffers bietet.

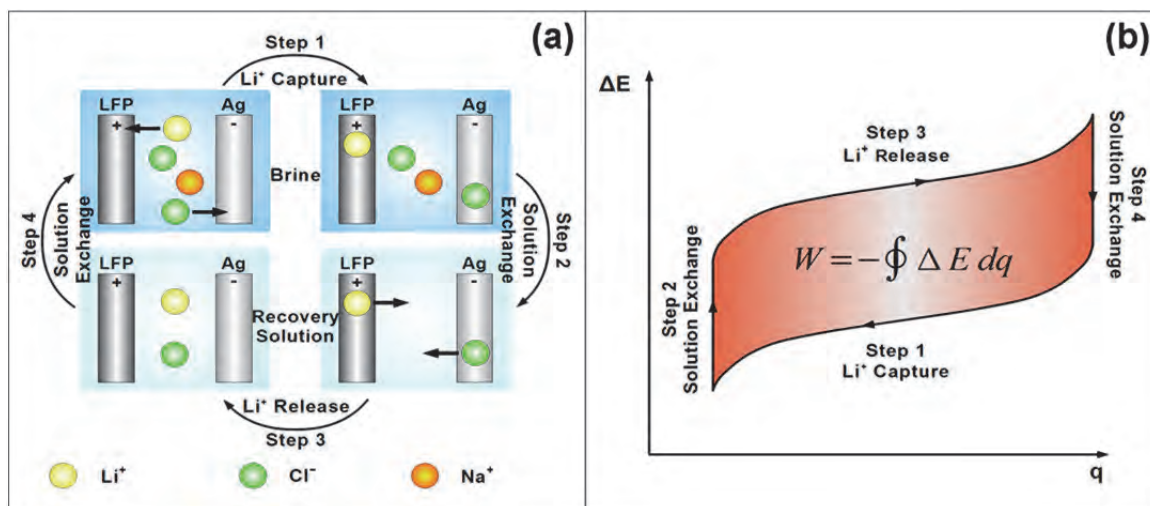
Fabio La Mantia

CES – Zentrum für Elektrochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

Email: fabio.lamantia@rub.de ; www.ruhr-uni-bochum.de/ces/Fabio.html

M. Pasta, A. Battistel, F. La Mantia, *Energy Environ. Sci.* 5 (2012) 9487-9491. Batteries for lithium recovery from brines.



Lithium is the primary component of the lithium-ion batteries destined to power the next generation of electric vehicles. The large anticipated demand for lithium has provoked debate regarding the long-term availability and price of lithium reserves. Now most lithium comes from brine lakes and saltpans but its recovery is delicate and quite expensive, and involves evaporation of large masses of water (lime soda evaporation process). In this work we developed a new battery that can efficiently recover lithium as LiCl from brines. The device is based on the previous idea of the mixing entropy battery and of the desalination battery, and it is composed by a lithium-capturing cationic electrode (LiFePO₄) and a chloride-capturing anionic electrode (Ag). The LiFePO₄ has shown selectivity towards lithium with respect to sodium equal to 500:1. By using this device it was possible to convert a sodium-rich brine (Li:Na equal to 1:100) into a lithium-rich solution (Li:Na equal to 5:1) by consuming 144 Wh per kg of lithium.

Lithium ist die Hauptkomponente in Lithium-Ionen-Batterien für den Antrieb der nächsten Generation von Elektrofahrzeugen. Der hohe erwartete Bedarf an Lithium hat eine Debatte hinsichtlich der langfristigen Verfügbarkeit und des Preises der Lithiumreserven ausgelöst. Zur Zeit kommt der Großteil an Lithium aus Salzseen und -tonebenen, aber die Gewinnung ist schwierig und kostenintensiv, und beinhaltet Verdampfung von großen Massen von Wasser (lime soda evaporation process). Hier wurde eine neue Batterie entwickelt, mit der Lithium in Form seines Chloridsalzes effizient aus Salzlösungen gewonnen werden kann. Die Batterie stellt eine Modifikation der von uns entwickelten Mischungsentropie-Batterie und Entsalzungsbatterie dar und besteht aus einer Lithium-Einfangkathode (LiFePO₄) und einer Chlorid-Einfanganode (Ag). Eine natriumreiche Salzlösung (Li:Na im Verhältnis 1:100) kann in eine lithiumreiche Lösung (Li:Na im Verhältnis 5:1) überführt werden, wobei 144 Wh pro kg Lithium an Energie verbraucht werden.

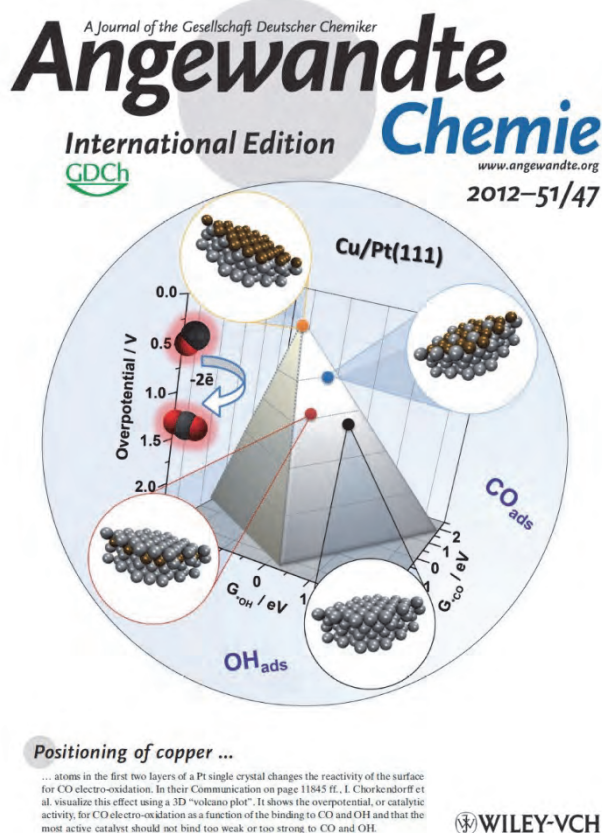
Aliaksandr Bandarenka

Zentrum für Elektrochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: +49 (0) 234 - 32 29433; FAX: +49 (0) 234 32 14420

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

A.S. Bandarenka, A.S. Varela, M. Karamad, F. Calle-Vallejo, L. Bech, F.J. Perez-Alonso, J. Rossmeisl, I.E.L. Stephens, I. Chorkendorff, *Angewandte Chemie Int. Ed.* **51** (2012) 11845-11848. The design of an active site towards optimal electrocatalysis: Overlayers, surface alloys and near-surface alloys of Cu/Pt(111).



An active site has been designed for the catalysis of CO electrooxidation. This was achieved by incorporating sub-monolayer amounts of Cu (orange spheres) into a single crystal of Pt (gray spheres). The electrochemical reactivity of this surface was highly sensitive to the exact position of Cu. Cu atoms in the first layer strengthen the Pt binding energy towards *H , *OH , and *CO . Using this knowledge, we tailored the configuration of Cu atoms in Pt(111) for the electro-oxidation of CO. A large number of electrochemical processes for sustainable fuel production and utilization are controlled by the binding to these adsorbates. Our general approach, outlined in the publication, could enable further progress to be made to the catalysis of all these important reactions.

Durch die Einführung von einer Sub-Monolage Kupfer in einen Pt-Einkristall wurden aktive Zentren für die Katalyse der CO-Elektrooxidation erzeugt. Die elektrochemische Reaktivität der Katalysator-Oberfläche wird signifikant von der exakten Position der Cu-Atome ab. Cu-Atome in der ersten Schicht erhöhen die Bindungsenergie von H , *OH und *CO . Auf der Basis dieser Erkenntnisse wurde eine für die Elektrooxidation von CO maßgeschneiderte Konfiguration von Cu in Pt(111) entwickelt. Die Bindung dieser drei Adsorbate spielt eine entscheidende Rolle in einer großen Zahl von elektrochemischen Prozessen im Bereich der nachhaltigen Energieproduktion. Durch unsere generelle Strategie für ein maßgeschneidertes Katalysatordesign können weitere Fortschritte in der Katalyse dieser wichtigen Reaktionen erreicht werden.

Dominik Marx

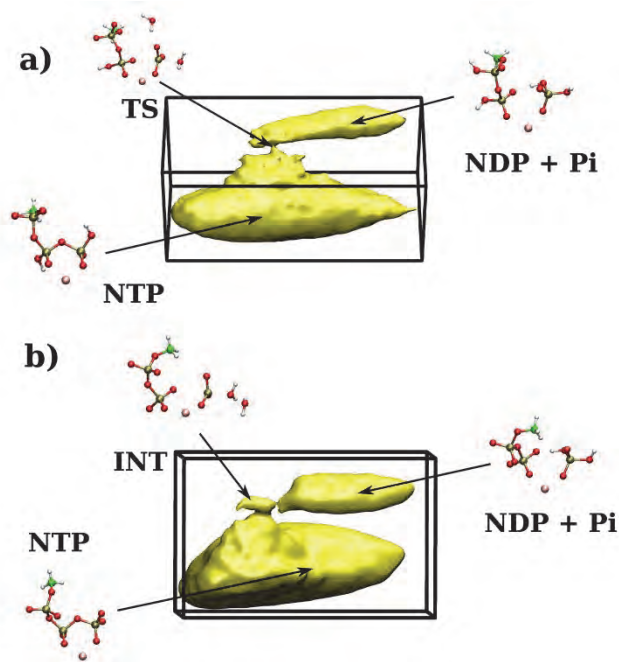
Lehrstuhl für Theoretische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

R. Glaves, G. Mathias, and D. Marx, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012) 6995-7000. Mechanistic Insights into the Hydrolysis of a Nucleoside Triphosphate Model in Neutral and Acidic Solution

Die Hydrolyse von Nukleosidtriphosphaten ist ein grundlegender Vorgang in lebenden Organismen. Der genaue Mechanismus dieser weitverbreiteten Reaktion ist allerdings trotz enormer Forschungsaktivitäten weiterhin unbekannt. In dieser Arbeit untersuchten wir den Hydrolysemechanismus eines Nukleosidtriphosphatmodells in saurer und neutraler wässriger Lösung mit beschleunigten ab initio Simulationen. Es wurde gezeigt, dass die Hydrolysen über verschiedene Mechanismen ablaufen. In beiden Fällen übernimmt allerdings ein benachbartes Wassermolekül die Rolle der Base, d.h. substratvermittelte Katalyse wurde nicht in wässriger Lösung beobachtet.



Nucleoside triphosphate hydrolysis is an essential process in all living systems. Despite extensive research, the exact modus and mechanism of this ubiquitous reaction still remain elusive. In this work, we examined the detailed hydrolysis mechanisms of a model nucleoside triphosphate in acidic and neutral aqueous solution by means of accelerated ab initio simulations. The two hydrolyses were found to proceed via different mechanisms. Yet, a neighboring water molecule took on the role of a general base in both systems, meaning that substrate-assisted catalysis was not observed in the bulk water environment.

Mediathek des Lehrstuhls mit weiteren Glanzlichtern:
<http://www.theochem.rub.de/go/media.html>

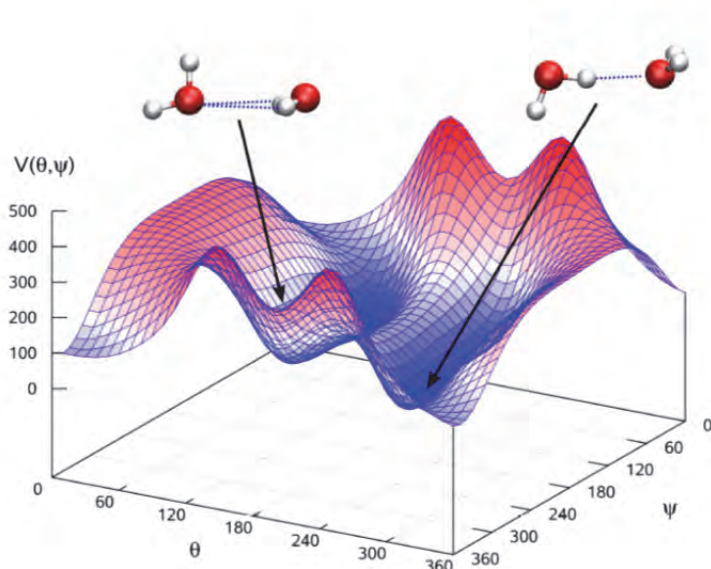
Jörg Behler

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.ruhr-uni-bochum.de>

T. Morawietz, V. Sharma, J. Behler, *J. Chem. Phys.* **136** (2012) 064103-1-11. A neural network potential-energy surface for the water dimer based on environment-dependent atomic energies and charges.



Understanding the unique properties of water still represents a significant challenge for theory and experiment. Computer simulations by molecular dynamics require a reliable description of the atomic interactions, and in recent decades countless water potentials have been reported in the literature. Still most of these potentials contain significant approximations, for instance frozen monomers. Artificial neural networks (NNs) offer a promising way for the construction of very accurate potential-energy surfa-

ces taking all degrees of freedom explicitly into account. As a first step towards a NN potential for water we present a full-dimensional NN potential for the water dimer. It is based on environment-dependent atomic energies, and long-range electrostatic interactions are taken into account employing environment-dependent atomic charges. We show that the potential and derived properties like vibrational frequencies are in excellent agreement with the underlying reference density-functional theory data.

Das Verständnis der Eigenschaften von Wasser stellt noch immer eine große Herausforderung für theoretische und experimentelle Untersuchungen dar. Molekulardynamik Simulationen erfordern eine ausreichend genaue Beschreibung der atomaren Wechselwirkungen, und eine große Zahl von Wasserpotentialen steht hierfür in der Literatur zur Verfügung. Dennoch basieren die meisten dieser Potentiale auf drastischen Näherungen, z.B. der Verwendung fixierter Monomergeometrien. Künstliche neuronale Netzen (NN) bieten einen vielversprechenden neuen Zugang zu hochgenauen Energieflächen, die alle Freiheitsgrade explizit berücksichtigen. Als ersten Schritt zur Konstruktion eines NN Potentials für Wasser präsentieren wir ein volldimensionales Potential für das Wasserdimer. Es basiert auf umgebungsabhängigen atomaren Energien, und langreichweitige elektrostatische Wechselwirkungen werden mit Hilfe von umgebungsabhängigen atomaren Punktladungen berücksichtigt. Wir zeigen, dass das Potential und daraus abgeleitete Größen wie z.B. Schwingungsfrequenzen hervorragend mit den zugrunde liegenden Dichtefunktionaldaten übereinstimmen.

Christof Hättig

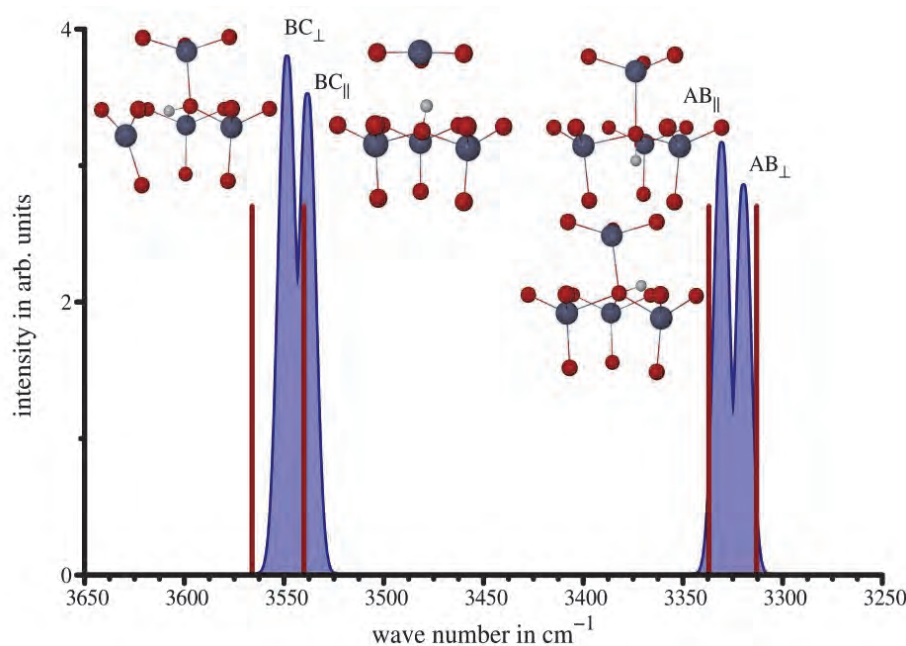
Theor. Chem. - Quantenchemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

J. Koßmann, C. Hättig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 16392-16399. Investigation of interstitial hydrogen and related defects in ZnO

We investigate defects in bulk zinc oxide by performing embedded cluster calculations within the density functional theory using the PBE functional. We obtain and discuss equilibrium structures and vibrational spectra of interstitial hydrogen species and of hydrogen complexes at zinc vacancies and at substitutional atoms like copper, beryllium, manganese and calcium in zinc positions. All of these defects differ in their vibrational frequencies which can be assigned to existing experimental data with an agreement that surpasses the results of earlier



calculations within the local (spin) density approximation. This leads to a better understanding of these bulk defects and helps to answer some open questions, as e.g. the assignment of a signal observed in infra red spectra at 3326 cm⁻¹. Furthermore, the computed vibrational spectra may serve as a benchmark and assist in the interpretation of future experimental results.

Wir untersuchen Defekte im Zinkoxid-Bulk im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie mit dem PBE-Funktional und eingebetteten Cluster. Es werden Gleichgewichtsstrukturen und Schwingungsspektren für interstitielle Wasserstoff-Species und Wasserstoff-Komplexe an Zink-Fehlstellen und substitutionellen Adatomen wie Kupfer, Beryllium, Mangan und Kalzium in Zink-Position erhalten und diskutiert. All diese Defekte unterscheiden sich in ihren Schwingungsfrequenzen und können experimentellen Daten mit einer Genauigkeiten zugeordnet werden, die die Ergebnisse vorangegangener Rechnungen mit der lokalen (Spin-)Dichtenäherung übersteigt. Dies führt zu einem besseren Verständnis dieser Bulk-Defekte und hilft offene Fragen zu beantwortet, wie z.B. die Zuordnung eines Signals, das im Infrarot-Spektrum bei 3326 cm⁻¹ beobachtet wurde. Darüber hinaus können die berechneten Schwinungsrechnungen als Referenz dienen und bei der Interpretation künftiger experimenteller Ergebnisse helfen.

Volker Staemmler

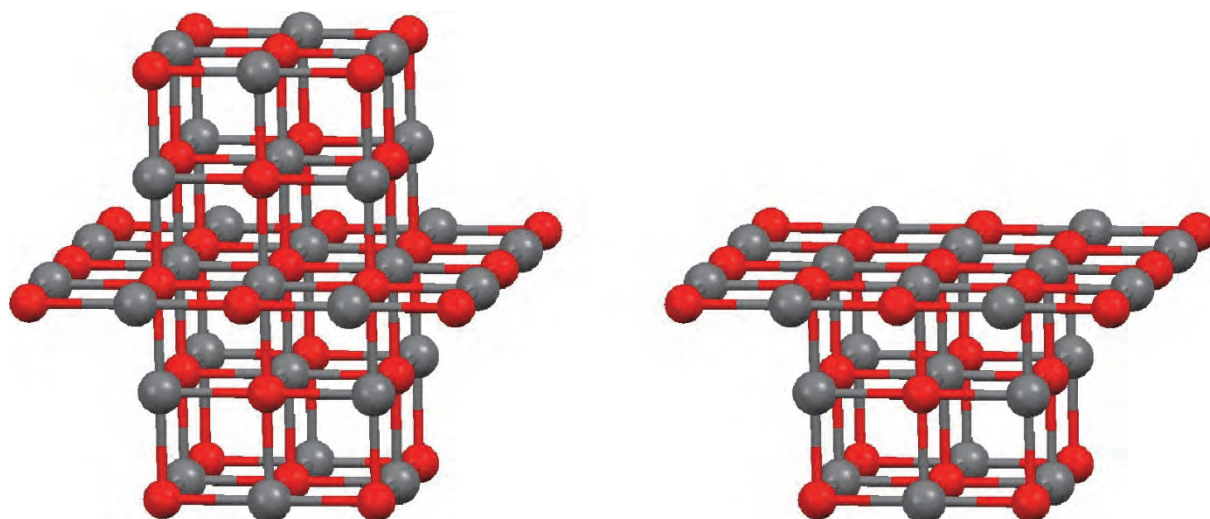
Theor. Chem. - Quantenchemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

F. Uhl, V. Staemmler, *J. Phys.: Condens. Matter*, **24** (2012) 305501. Ab initio calculation of correlation effects for the O1s core electron binding energy in MgO.

Die 1s Bindungsenergien von O-Atomen im Volumen und an der (001) Oberfläche von MgO wurden mit wellenfunktions-basierten quantenchemischen *ab initio* Methoden unter Verwendung eingebetteter Cluster berechnet. Dazu wurden das Koopmansche Theorem (KT), die Δ SCF-Näherung und zur Erfassung von Korrelationseffekten das MC-CEPA-Verfahren (eine genäherte Multi-Referenz Coupled-Cluster Methode) verwendet. Es zeigte sich, dass die Korrelationsbeiträge der Mg-Atome in der ersten und der O-Atome in der zweiten Koordinationsschale um das betrachtete O-Atom im wesentlichen additiv sind. Daher konnte eine sehr effiziente inkrementelle Methode angewandt werden, die die Rechnungen auch mit großen Basissätzen möglich machte. Die Resultate für die O1s Bindungsenergien sind 533.47 and 533.50 eV für MgO und die MgO(001) Oberfläche, mit Korrelationsbeiträgen von 0.77 beziehungsweise 0.70 eV. Der berechnete "surface core level shift" (SCLS) ist sehr klein, nur 0.03 eV, in exzellenter Übereinstimmung mit neueren Experimenten.



Wavefunction based ab initio embedded cluster calculations were employed to calculate the O1s core electron binding energies (CEBEs) of bulk MgO and the MgO(001) surface. Different approximations were used: Koopmans' theorem (KT), the Δ SCF approach and the MC-CEPA method (which is an approximate multi-reference coupled cluster approach to include correlation effects). The correlation contributions to the O1s CEBE of the central O atom due to the Mg atoms in the first and the O atoms in the second coordination shell turned out to be additive to a large extent. Therefore, they could be evaluated in a very efficient incremental fashion. This makes the calculations feasible, even if large basis sets are used. The final results for the O1s CEBEs are 533.47 and 533.50 eV for bulk MgO and the MgO(001) surface, to which electron correlation contributes 0.77 and 0.70 eV, respectively. The calculated surface core level shift (SCLS) is very small, only 0.03 eV, which agrees perfectly with recent experiments.

Robert Franke

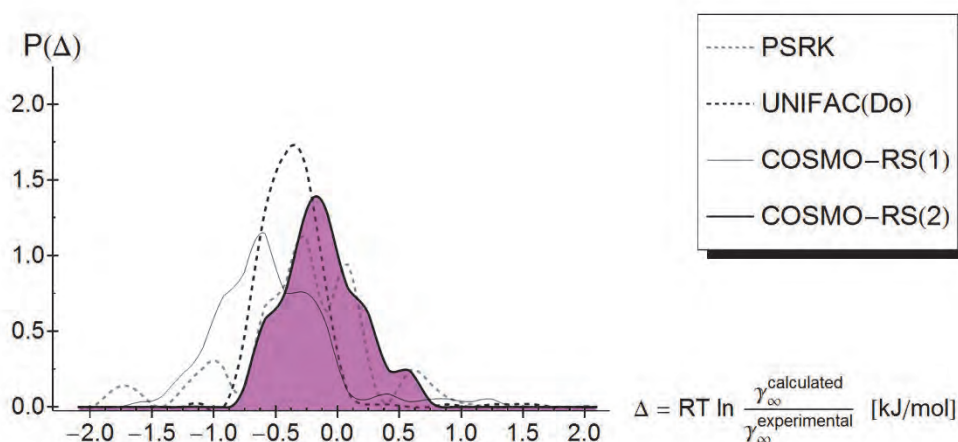
Evonik Industries AG, Paul-Baumann-Straße 1, D-45772 Marl

Tel.: ++49-(0)2365-492899; FAX: ++49-(0)2365-49802899

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

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

R. Franke, B. Hannebauer, S. Jung, *Fluid Phase Equilib.*, **340**, (2013), 11-14 [published online 3 December 2012]. Accurate pre-calculation of limiting activity coefficients by COSMO-RS with molecular-class based parameterization



Das „conductor-like screening model of real solvents“ (COSMO-RS) berechnet mischphasen-thermodynamische Größen wie Grenzaktivitätskoeffizienten ausgehend von quantenchemisch berechneten Abschirmladungsdichten unter Verwendung eines universellen Parametersatzes. In dieser Arbeit wurde erstmalig gezeigt, dass hierin eine Ursache der Ungenauigkeit bei prädiktiven Rechnungen liegt, aus welcher die Überlegenheit rein empirischer Methoden wie UNIFAC resultiert. Durch eine individuell für die im Rahmen einer technisch-chemischen Fragestellung relevante Molekülklasse angepasste Parametrierung resultiert eine deutlich verbesserte Vorhersagegüte, wie am Beispiel der industriell wichtigen Molekülklasse „Olefine/Alkohole“ illustriert wird, bei der die Vorhersagegüte von UNIFAC(Do), der z. Z. genauesten empirischen Methode, erreicht werden konnte.

The “conductor-like screening model of real solvents” (COSMO-RS) enables the calculation of mixed-phase thermodynamic quantities such as limiting activity coefficients, based on screening charge densities calculated using quantum chemical methods and based on a universal parameter set. In this paper, we showed for the first time that the universal parameter set is a reason for the failure of quantitative predictions and for the consequent superiority of purely empirical methods like UNIFAC. Using a parameterisation for the molecular-class chosen for its relevance to a particular chemical problem, significantly improved accuracy can be reached. For the industrially important molecular-class “olefin/alcohol” it was demonstrated that COSMO-RS then achieves the same level of accuracy as UNIFAC(Do), to date the most precise empirical method.

Martin Muhler

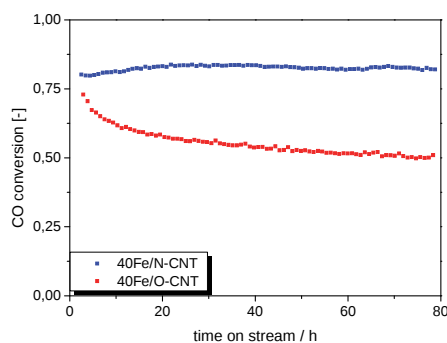
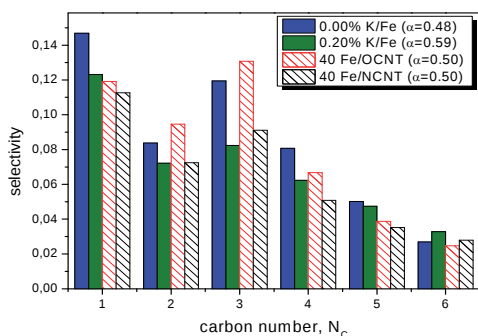
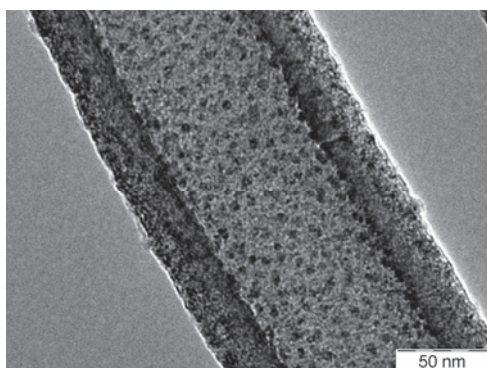
Lehrstuhl für Technische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

H.J. Schulte, B. Graf, W. Xia, M. Muhler, *ChemCatChem* **4** (2012) 350-355. Nitrogen- and Oxygen-Functionalized Multiwalled Carbon Nanotubes Used as Support in Iron-Catalyzed, High-Temperature Fischer-Tropsch Synthesis.

Werden bei der Fischer-Tropsch-Synthese Eisenkatalysatoren bei höheren Temperaturen eingesetzt, lassen sich aus Synthesegas ($\text{CO} + \text{H}_2$) kurzkettige Olefine erzeugen. Dies ist wieder von großem Interesse, da sich Synthesegas auch aus nachwachsenden Rohstoffen herstellen lässt. Bislang wurden vor allem ungeträgerte Eisenkatalysatoren eingesetzt, die langwierige Aktivierungsprozeduren erfordern. Die Synthese von Eisennanopartikeln auf stickstoffdotierten Kohlenstoffnanoröhren (NCNTs) ergab hochaktive Katalysatoren, die auch bezüglich der Selektivität konventionellen kalium-promotierten Systemen weit überlegen waren.



High-temperature Fischer-Tropsch synthesis for the production of short-chain olefins over iron catalysts supported on multi-walled carbon nanotubes (CNTs) was investigated under industrially relevant conditions (340 °C, 25 bar, $\text{H}_2/\text{CO} = 1$). Surface functionalization of the CNTs was achieved by a gas-phase treatment using nitric acid vapor at 200 °C for oxygen functionalization (O-CNTs) and ammonia at 400 °C for the subsequent nitrogen doping (N-CNTs). Ammonium iron citrate impregnation followed by calcination was used for the deposition of iron nanoparticles with particle sizes below 9 nm. Both types of catalyst showed an excellent olefin selectivity ($\text{C}_3\text{-C}_6 > 85\%$) and low chain-growth probability ($\alpha \leq 0.5$). The TEM analysis of the used catalysts detected particle sizes of 23 nm and 26 nm on O-CNTs and N-CNTs, respectively, and Fe_5C_2 was identified as major phase by XRD with only traces of Fe_3O_4 . An almost two-fold higher remaining activity was found for the Fe/N-CNT catalysts, which are considered excellent Fischer-Tropsch catalysts due to their high activity, high selectivity to olefins, low chain-growth probability, and superior long-term stability.

Wolfgang Grünert

Technische Chemie – Struktur/Aktivität heterogener Katalysatoren

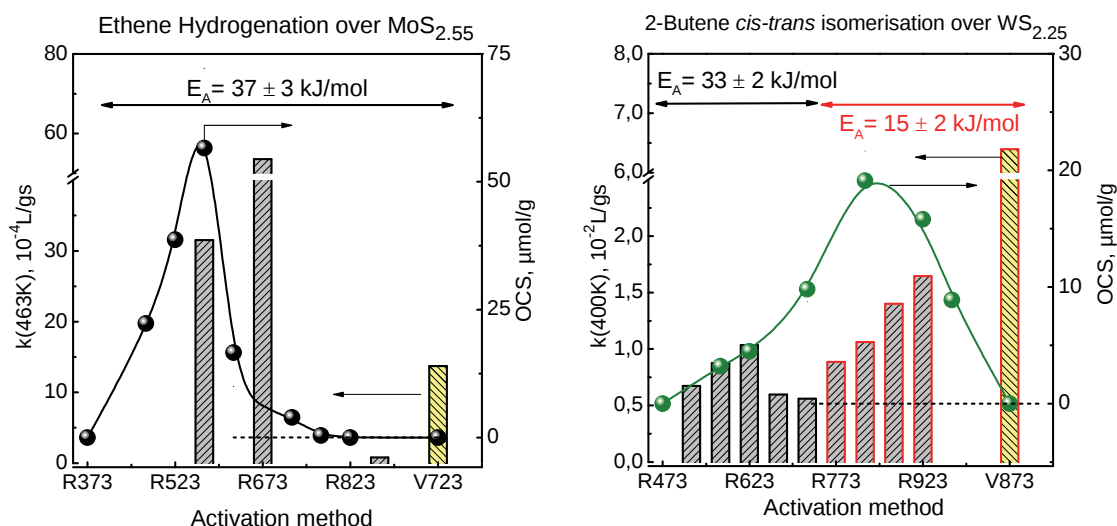
Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

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

email: Wolfgang.Gruenert@techchem.rub.de; <http://www.techchem.rub.de/>

T. Drescher, F. Niefind, W. Bensch, W. Grünert, *J. Amer. Chem. Soc.* **134** (2012) 18896-18899. Sulfide Catalysis without coordinatively unsaturated sites: Hydrogenation, *cis-trans* isomerisation and H_2D_2 scrambling over MoS_2 and WS_2

MoS_2 und WS_2 können einfache Testreaktionen wie die Hydrierung von Ethen, die *cis-trans*-Isomerisierung von 2-Buten und das Isotopenscrambling zwischen H_2 und D_2 auch in Oberflächenzuständen katalysieren, die Sauerstoff nicht chemisorbieren. Durch XPS wurde bestätigt, dass solche Oberflächen mit Sulfidspezies abgesättigt sind. Damit sind klassische Konzepte, nach denen für den Ablauf dieser Reaktionen an Sulfidoberflächen die Kationen über Koordinationslücken zugänglich sein müssen, experimentell widerlegt. Die Ergebnisse stützen neuere Vorstellungen über die aktiven Zentren, die an Modellkatalysatoren bzw. über theoretische Rechnungen entwickelt worden sind, bis jetzt aber noch keine experimentelle Bestätigung unter realen Katalysebedingungen gefunden haben.



MoS_2 and WS_2 can catalyze simple test reactions as ethene hydrogenation, 2-butene *cis-trans* isomerization and H_2/D_2 scrambling in surface states which do not chemisorb oxygen. It was confirmed by XPS that such surface is saturated by sulfide species. This is a clear experimental disproof of classical concepts that require coordinative unsaturation of the cations for catalytic reactions to occur on the surfaces of sulfides. The results support new concepts on active sites which have been developed on model catalysts and by theoretical calculations so far, but have been in need of confirmation from real catalysis.

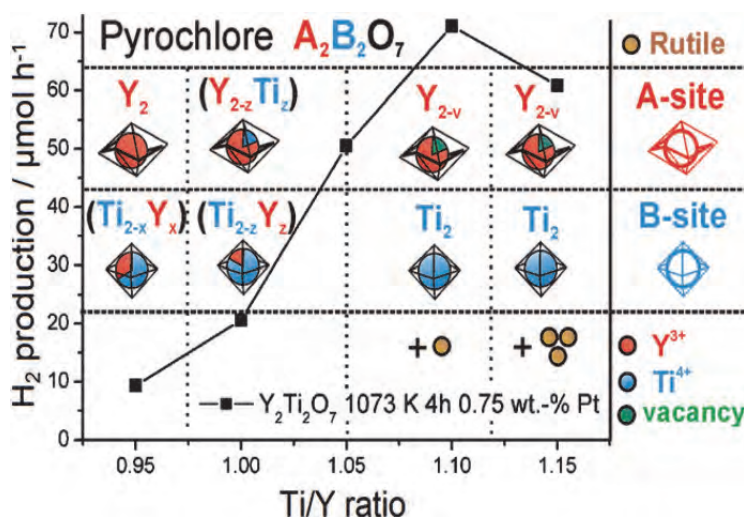
Michael Wark

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

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

e-mail: michael.wark@techem.rub.de; <http://www.techem.ruhr-uni-bochum.de>

O. Merka, D. W. Bahnemann, M. Wark, *ChemCatChem* 4 (2012) 1819-1827, Improved Photocatalytic Hydrogen Production by Structure Optimized Non-Stoichiometric $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$



The photocatalytic activity of pyrochlore $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ is determined by cationic lattice distortion, average particle sizes and the presence of rutile. These factors are controlled by the Ti/Y ratio and the annealing temperature. As determined by variations in the lattice parameter and the peak intensity ratios in X-ray diffraction patterns; the lattice distortion minimizes with increasing Ti/Y ratio.

Probing $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ prepared with different Ti/Y ratios in the hydrogen producing photocatalytic test

reaction provides clear evidence that decreased cationic lattice distortion leads to greatly enhanced photocatalytic activities. At an annealing temperature of 1023 K, only the minimization of cationic distortion is responsible for an increase in photocatalytic activity from 9 $\mu\text{mol H}_2/\text{h}$ to 71 $\mu\text{mol H}_2/\text{h}$, while even a negative effect of slightly increasing particle sizes is compensated. A maximum photonic efficiency of 1.4 % is achieved. Hydrogen production rates remain constant with time, if platinum is used as co-catalyst. Applying rhodium as co-catalyst on a high band-gap material like $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ results in decreasing activities attributed to the oxidation of rhodium by photogenerated holes.

Die photokatalytische Aktivität des Pyrochlors $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ wird durch eine kationische Gitterverzerrung, die mittleren Partikelgrößen und das Vorhandensein von Rutil bestimmt. Diese Faktoren können über das Ti/Y-Verhältnis und die Kalzinationstemperatur gesteuert werden. Über die Variation der Gitterparameter und die Intensitätsverhältnisse in der Röntgendiffraktogrammen wurde beobachtet, dass sich mit der Erhöhung des Ti/Y-Verhältnisses die Gitterverzerrung minimiert.

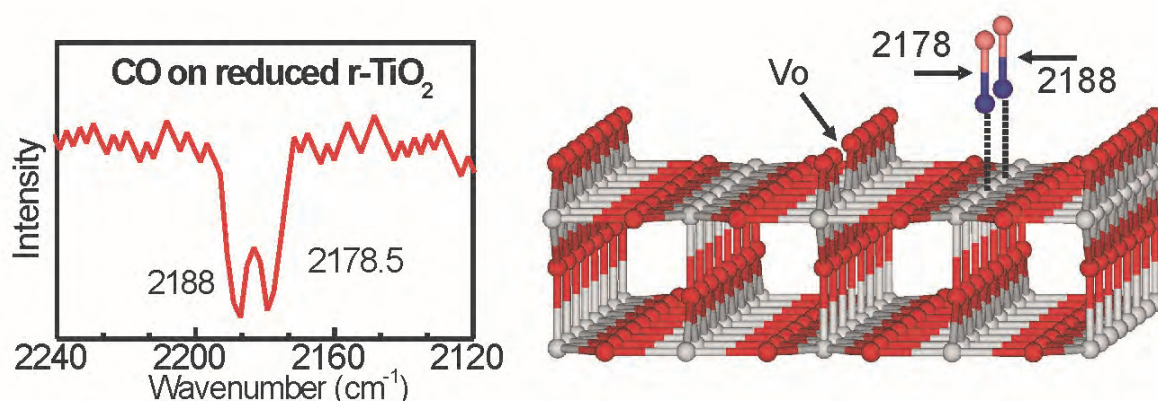
Der Einsatz von Yttriumtitanat mit unterschiedlichen Ti/Y-Verhältnissen in der licht-induzierten Wasserstoff-Erzeugung zeigt deutlich, dass eine reduzierte Gitterverzerrung zu stark erhöhten photokatalytischen Aktivitäten. Für Proben, die bei 1023 K gegläht wurden, kann durch Minimierung der Verzerrung eine Erhöhung der photokatalytischen H_2 -Produktionsrate von 9 $\mu\text{mol H}_2/\text{h}$ auf 71 $\mu\text{mol H}_2/\text{h}$ erzielt werden, wobei sogar ein negativer Effekt der leicht ansteigenden Korngrößen kompensiert wird. Eine maximale Effizienz photonischen von 1,4% erreicht ist. Die Wasserstoff-Produktionsraten bleiben über die Zeit konstant, wenn Platin als Co-Katalysator verwendet wird; mit Rhodium als Co-Katalysator wird bei dem $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, welches eine große Bandlücke aufweist, dahingegen eine mit der Zeit abnehmende Aktivitäten beobachtet, da die durch Licht erzeugten Löcher das Rhodium partiell oxidieren.

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.rub.de; <http://www.rub.de/ag-wang>

M. Xu, H. Noei, K. Fink, M. Muhler, Y. Wang, Ch. Wöll, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51** (2012) 4731-4734. The surface science approach for understanding reactions on oxide powders: The importance of IR spectroscopy.

Die Rolle von Defekten, besonders von Sauerstoff-Fehlstellen, auf Oxidoberflächen gilt seit je als entscheidend in der Grenzflächenchemie derartiger Substrate. Hier stellen wir einen neuen Ansatz vor, mit dem Sauerstofffehlstellen auf Oxidoberflächen mit Ultrahochvakuum-IR-Spektroskopie (UHV-FTIRS) untersucht werden können. Unsere qualitativ hochwertigen UHV-FTIRS-Daten, die für Rutil-TiO₂-Oberflächen, Einkristalle und Pulverpartikel gemessen wurden, belegen eindeutig, dass auf reduziertem Rutil-TiO₂ gebildete O-Fehlstellen direkt mithilfe von CO als Sondenmolekül detektiert werden können. Wir haben das Potenzial dieses neuen Ansatzes, der sowohl für Einkristalloberflächen als auch für Pulverpartikel geeignet ist, durch Untersuchungen der Umwandlung von Formaldehyd in Ethylen, einer wichtigen C1-C1-Kupplungsreaktion, demonstriert. Wir konnten eindeutig bestätigen, dass die Ausbeute mit der Dichte von O-Fehlstellen an der Oberfläche von Rutil-TiO₂-Nanopartikeln korreliert.



The role of defects on oxide surfaces, especially that of oxygen defects, has been always considered crucial for the interfacial chemistry of such substrates. Here, we present a novel method capable of investigating oxygen vacancies on oxide surfaces by ultrahigh-vacuum IR spectroscopy (UHV-FTIRS). Our high-quality UHV-FTIRS data obtained on rutile TiO₂ surfaces of both single crystals and powder particles demonstrate that O vacancy sites formed on reduced TiO₂ can be directly monitored by using CO as a probe molecule. We demonstrate the potential of this novel approach for studying single-crystal surfaces as well as powder particles, by confirming that the conversion efficiency of formaldehyde to ethylene, an important C1-C1 coupling reaction, correlates with the density of O-vacancies at the surface of rutile TiO₂ nanoparticles.

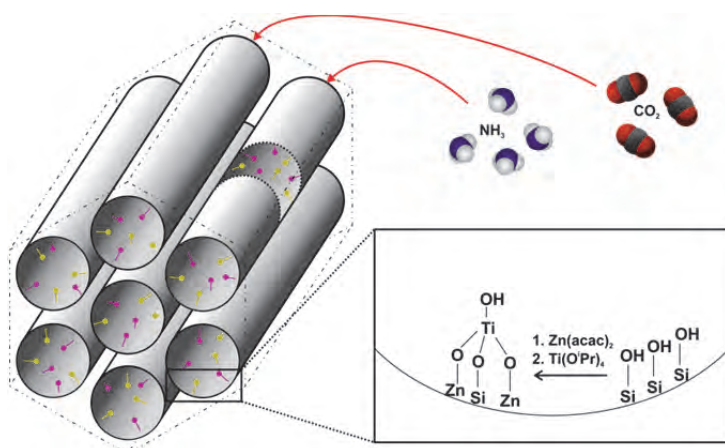
Jennifer Strunk

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

Tel.: ++49-(0)234-3223566; FAX: ++49-(0)234-3214115

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

B. Mei, A. Becerikli, A. Pougin, D. Heeskens, I. Sinev, W. Grünert, M. Muhler, J. Strunk, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 14318-14327. Tuning the Acid/Base and Structural Properties of Titanate-Loaded Mesoporous Silica by Grafting of Zinc Oxide.



Die Herstellung nützlicher Chemikalien wie Methanol oder Methan durch photokatalytische Reduktion von CO_2 erlangt zurzeit erneut Aufmerksamkeit als viel-versprechender Prozess zur Verringerung des Treibhausgasausstoßes und zur Produktion erneuerbarer Rohstoffe für die Industrie. Erste erfolgversprechende Ergebnisse der photokatalytischen CO_2 -Reduktion wurden mit TiO_x -Spezies eingebaut in oder geträgert auf mesoporösem SiO_2

erzielt. Allerdings ist die Aktivität der Materialien noch gering und es ist umstritten, ob die isolierten Titanatspezies CO_2 adsorbieren können. In der vorliegenden Arbeit wurde deutlich, dass die Adsorption von CO_2 an geträgerten TiO_x -Spezies auf SBA-15 nahe Raumtemperatur vernachlässigbar gering ist. Demgegenüber wurde mittels Adsorption von Ammoniak die Anwesenheit saurer Zentren nachgewiesen. Einem wissensbasierten Ansatz folgend wurden über eine Verankerungsmethode zusätzlich isolierte ZnO_x -Spezies auf den Träger eingebracht. So wurden basische Zentren erzeugt, wodurch die Adsorptionseigenschaften gegenüber CO_2 verbessert wurden. Über eine ausführliche Charakterisierung der Materialien wurde gezeigt, dass TiO_x und ZnO_x in Nachbarschaft zueinander stehen. Zudem konnte gezeigt werden, dass die Präparationsmethode der TiO_x - und ZnO_x -haltigen Materialien Einfluss auf die Titanatstruktur hat. Wenn ZnO_x zuerst eingebracht wird, scheint das Titanat bevorzugt an ZnO_x zu koordinieren, so dass Ti-O-Zn Bindung anstelle von Ti-O-Si Bindungen ausgebildet werden.

The photocatalytic reduction of carbon dioxide to valuable chemicals such as methanol and methane has recently regained attention as a desirable process for curbing greenhouse gas emissions and for producing renewable feedstock for industrial production. Promising results were obtained with TiO_x species incorporated in or supported on mesoporous silica. However, the activity of these materials was still low and there is a debate whether isolated titanate species are able to adsorb CO_2 . In the present work, the adsorption of CO_2 on supported TiO_x species on SBA-15 near room temperature was found to be negligible. On the other hand, by adsorption of ammonia, the presence of acidic sites was detected. Using a knowledge-based approach isolated ZnO_x species were additionally introduced on the support by a grafting procedure. Thus, basic sites were introduced which improved the adsorption properties towards CO_2 . Additionally, a thorough characterization of the materials was carried out confirming a close proximity between the TiO_x and ZnO_x species. It could be shown that the titanate structure strongly depends on the preparation of the TiO_x - and ZnO_x -containing materials. When ZnO_x is grafted first, TiO_x seems to coordinate to ZnO_x preferably, leading to the formation of Ti-O-Zn bonds instead of Ti-O-Si bonds.

Michael Hollmann

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

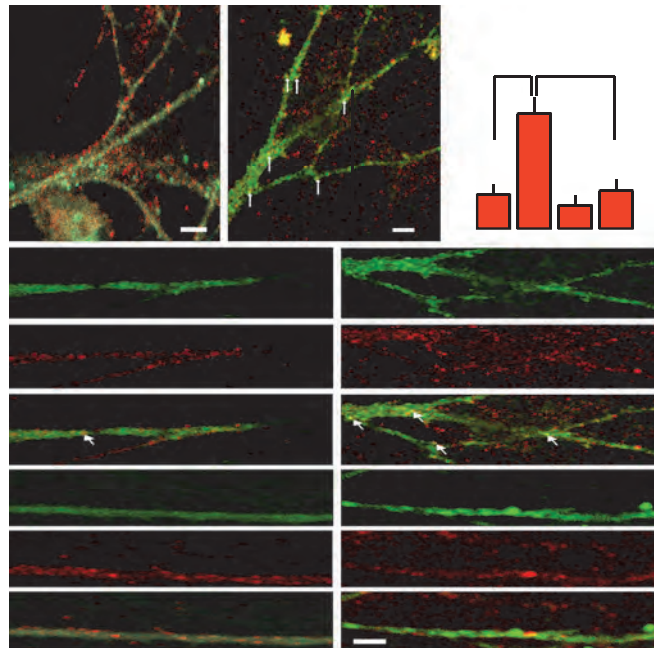
Tel.: ++49-(0)234-3224225; FAX: ++49-(0)234-3214244

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

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

G. Seeböhm, S. Neumann, C. Theiss, T. Novkovic, E.V. Hill, J.M. Tavaré, F. Lang, M. Hollmann, D. Manahan-Vaughan, N. Strutz-Seeböhm. *PLoS One* 7(3) (2012) e33889. Identification of a novel signaling pathway and its relevance for GluA1 recycling.

AMPA-type glutamate receptors carry the bulk of basal excitatory neurotransmission in the brain, and are the target of plasticity-dependent changes triggered by NMDA receptor activation. In this study we used cultured hippocampal primary neurons to elucidate the mechanistic details how NMDA receptor activation is translated into increased AMPA receptor activity. We showed that SGK3 (serum glucocorticoid-dependent kinase 3) is upregulated after NMDA receptor activation, leading to activating phosphorylation of PIKfyve (phosphoinositol-3-phosphate-5-kinase) that in turn phosphorylates PIP (phosphoinositol phosphate) to create PI(3,5)P2 (phosphatidylinositol-3,5-diphosphate). PI(3,5)P2 then modulates the GTPase RAB11A to facilitate vesicle transport to the plasma membrane to insert additional AMPA receptors from an intracellular reserve pool into the active zone of the synapse, thereby increasing the postsynaptic response at that particular synapse (see also colocalization of receptors and red (post-synaptic PSD95 protein of 95 kDa) in figure G). In line with this mechanism described of PIKfyve in hippocampal slices reduces synaptic transmission.



des AMPA-Typs basale exzitatorische Neurotransmission im Gehirn und sind andererseits das Ziel der synaptischen

NMDA-Rezeptoraktivierung erzeugen. Wir haben Primärkulturen hippocampaler Neuronen benutzt um die Mechanismen aufzuklären, die NMDA-Rezeptoraktivierung in erhöhte AMPA-Rezeptoraktivität übersetzen. Wir konnten zeigen, dass SGK3 (für Abkürzungen s. englischen Text) nach NMDA-Rezeptoraktivierung hochreguliert wird, was zur Phosphorylierung der Kinase PIKfyve führt, die ihrerseits PI zu PI(3,5)P2 phosphoryliert. PI(3,5)P2 moduliert die GTPase RAB11A die Vesikeltransport in die Plasmamembran ankurbelt, wodurch zusätzliche AMPA-Rezeptoren aus einem intrazellulären Reservepool in die aktive Zone der Synapse gebracht werden. Dadurch wird die postsynaptische Reaktion auf einen präsynaptischen Reiz verstärkt (siehe auch die Zunahme der Koloakklation von AMPA-Rezeptoren (grün) mit dem postsynaptischen Protein PSD in den Teilabbildungen B, C, E und G). Unser Modell wird durch die Beobachtung bestätigt, dass Blockade von PIKfyve die synaptische Transmission in hippocampalen Gewebeschnitten blockiert.

Glutamatrezeptoren tragen einerseits die exzitatorische Neurotransmission im Gehirn und sind andererseits das Ziel der synaptischen Plastizität durch

Rolf Heumann

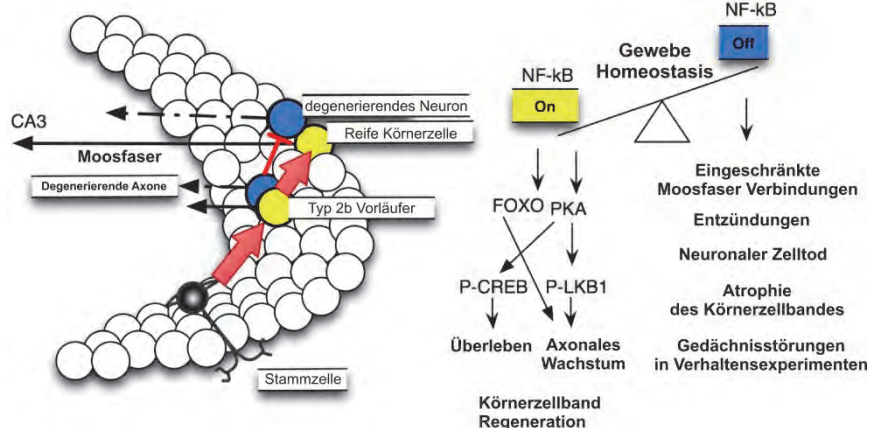
Biochemie II - Molekulare Neurobiochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: rolf.heumann@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/mol-neurobio/Lehrstuhl/Molneurobio.html>

Y. Imielski, J.C. Schwamborn, P. Lüningschrör, P. Heumann, M. Holzberg, H. Werner, O. Leske, A.W. Püschel, S. Memet, R. Heumann, A. Israel, C. Kaltschmidt, B. Kaltschmidt *PLoS ONE* 7 (2012): e30838. Regrowing the adult brain: NF- κ B controls functional circuit formation and tissue homeostasis in the dentate gyrus.

Bestimmte kognitive Funktionen sind im hohen Lebensalter in der Regel rückgängig und sind mit einem Verlust von Nervenzellen verbunden. Dies trifft insbesondere für den Hippocampus zu, eine Gehirnstruktur, die auch im erwachsenen Organismus noch neue Nervenzellen generieren kann. Konditionale genetische Unterdrückung der Synthese eines DNA-bindenden Proteinfaktors NF- κ B führt in Mausmodellen zum massiven Verlust von Nervenzellen, der -trotz erhöhter Neubildung und Integration der neugeborenen Nervenzellen in das geschädigte neuronale Netzwerk- nicht mehr ausgeglichen werden kann. Es findet eine Atrophie von axonalen Verbindungen im Hippocampus statt, die Moosfasern (mossy fibres) genannt werden. Reaktivierung des NF- κ B bewirkt über die Kontrolle der Synthese des Transkriptionsfaktors FOXO und der Proteinkinase A neuronales Überleben bzw. axonales Wachstum, was letztlich die vorher beobachteten Defizite wieder völlig rückgängig machen kann.



Die Ergebnisse zeigen also, dass durch NF- κ B Aktivität in Nervenzellen die durch neuronale Degeneration hervorgerufene Defekte wieder heilen kann und somit neue Hoffnung für die Therapie von neurodegenerativen Krankheiten geweckt wird.

Aging is generally accompanied with a decline in cognitive functions correlating with a continuous loss of neurons within the brain and especially in a brain region named hippocampus. The latter is well established for its capacity to generate new neurons by adult neurogenesis possibly allowing the regeneration of nerve cells. Here we show that genetic ablation of a transcription factor named NF- κ B resulted in severe defects in the neurogenic region (*dentate gyrus*) of the hippocampus. Despite increased stem cell proliferation, axogenesis, synaptogenesis and neuroprotection were hampered, leading to disruption of the mossy fiber pathway and to atrophy of the *dentate gyrus* during aging. Here we show that, the transcription factor NF- κ B controls the transcription of FOXO1 and PKA, regulating axogenesis. Structural defects culminated in behavioral impairments as measured in the capacity to perform memory tasks in a test named pattern separation. Re-activation of NF- κ B resulted in integration of newborn neurons, finally to regeneration of the *dentate gyrus*, accompanied by a complete recovery of structural and behavioral defects. These data identify NF- κ B as a crucial regulator of *dentate gyrus* tissue homeostasis suggesting NF- κ B to be a therapeutic target for treating cognitive and mood disorders.

Irmgard Dietzel-Meyer

Lehrstuhl für Molekulare Neurobiochemie – AG Elektrobiologie neuraler Zellen
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum; Tel.: ++49-(0)234-3225803;
Fax: ++49-(0)234-3214105 email: Irmgard.Dietzel-Meyer@ruhr-uni-bochum.de
http://dbs-lin.rub.de/idm/IDM_Home.html

P. Happel, D. Thatenhorst and I. D. Dietzel, *Sensors* **12** (2012) 14983-15008, Scanning Ion Conductance Microscopy for studying biological samples (<http://www.mdpi.com/1424-8220/12/11/14983>)

Scanning ion conductance microscopy (SICM) is a scanning probe technique that allows one to trace the contours of insulating surfaces in electrolyte solution. Since it monitors the distance between probe and sample by detecting the resistance changes that occur upon close approximation of the scanning electrode to the scanned surface thus avoiding touching the surface it is particularly useful for observing the delicate membrane dynamics of living cells for periods up to several hours. Since quantitative data sets are produced the method can be used to quantify membrane surfaces and local cellular volume changes in response to transmembrane water fluxes. Additional information can be provided by combining SICM with various techniques such as fluorescence microscopy or patch clamping to reveal topographically resolved information about the distribution and function of ion channels in the membranes. In addition to summarizing recent developments and applications of SICM in this review we provide additional data showing the possibility of combining SICM with ion selective micro-electrodes in order to monitor local ion activities at the surface of living cells.

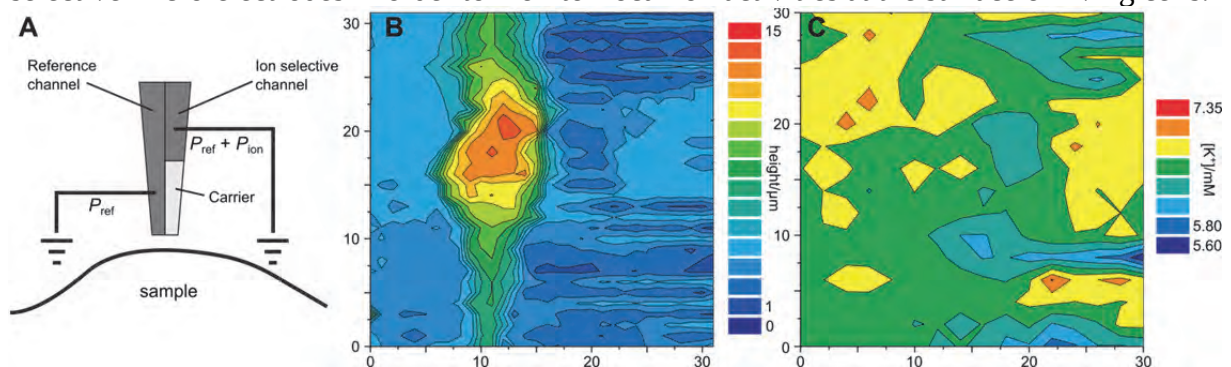


Figure1: **A** Principle of a double-barreled scanning electrode composed of a reference channel used for SICM imaging and an ion sensitive channel filled with a K^+ -selective resin. **B** Color coded representations of the topography and **C** of the surrounding K^+ activity of a single cell from rat brain recorded by SICM. Note, that the reference channel contained 1mM glutamate to locally stimulate K^+ efflux out of excited cellular processes.

Die Raster-Ionenleitfähigkeitsmikroskopie (SICM) erlaubt, die Konturen isolierender Oberflächen in Elektrolytlösungen quantitativ darzustellen. Da das Verfahren den Abstand zwischen Messspitze und Objekt über Widerstandsänderungen detektiert, die bei starker Annäherung der Elektroden spitze an die Oberfläche auftreten und daher Berührungen der Oberfläche vermieden werden können, eignet es sich besonders für die Beobachtung der Membrandynamik empfindlicher lebender Zellen. Da quantitative Datensätze generiert werden kann die Methode eingesetzt werden, um Membranoberflächen auszumessen und durch lokale Wasserflüsse über die Membran induzierte Volumenänderungen zu quantifizieren. Zusätzliche Informationen können durch Kombination mit weiteren Methoden, wie z.B. der Fluoreszenzmikroskopie oder der Patch-Clamp Technik erhalten werden, um topographisch aufgelöste Informationen über die Verteilung und Funktion von Ionenkanälen in den Membranen zu gewinnen. In dieser Arbeit stellen wir aktuelle Entwicklungen und Anwendungen dieser Mikroskopiemethode vor. Zusätzlich zeigen wir die Verwendung von ionenselektiven Mikroelektroden, um lokale Ionenaktivitäten auf den Oberflächen lebender Zellen ortsaufgelöst nachzuweisen.

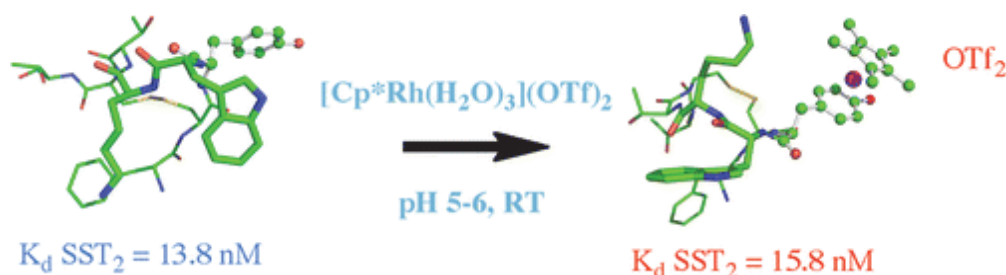
Raphael Stoll

Biomolekulare Spektroskopie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: raphael.stoll@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/bionmr>

H. B. Albada, F. Wieberneit, I. Dijkgraaf, J.H. Harvey, J.L. Whistler, R. Stoll, N. Metzler-Nolte, R.H. Fish, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012) 10321-10324. The Chemoselective Reactions of Tyrosine-Containing G-Protein-Coupled Receptor Peptides with $[\text{Cp}^*\text{Rh}(\text{H}_2\text{O})_3](\text{OTf})_2$, Including 2D NMR Structures and the Biological Consequences



In this fruitful collaboration with the department of bioinorganic chemistry headed by Prof. Metzler-Nolte, the bio-conjugation of organometallic complexes with peptides has proven to be a novel approach for drug discovery. We report the facile and chemo-selective reaction of tyrosine-containing G-protein-coupled receptor (GPCR) peptides with $[\text{Cp}^*\text{Rh}(\text{H}_2\text{O})_3](\text{OTf})_2$, in water, at room temperature, and at pH 5–6. We have focused on three important GPCR peptides; namely, $[\text{Tyr}^1]$ -leu-enkephalin, $[\text{Tyr}^4]$ -neurotensin(8-13), and $[\text{Tyr}^3]$ -octreotide, each of which has a different position for the tyrosine residue, together with competing functionalities. Importantly, all other functional groups present, i.e., amino, carboxyl, disulfide, phenyl, and indole, were not prominent sites of reactivity by the Cp^*Rh tris aqua complex. Furthermore, the influence of the Cp^*Rh moiety on the structure of $[\text{Tyr}^3]$ -octreotide was characterized by 2D NMR, resulting in the first representative structure of an organometallic-peptide complex (see figure above). The biological consequences of these Cp^*Rh -peptide complexes, with respect to GPCR binding and growth inhibition of MCF7 and HT29 cancer cells, will be presented for $[(\eta^6\text{-Cp}^*\text{Rh-Tyr}^1)\text{-leu-enkephalin}](\text{OTf})_2$ and $[(\eta^6\text{-Cp}^*\text{Rh-Tyr}^3)\text{-octreotide}](\text{OTf})_2$.

In dieser intensiven Kollaboration mit der von Prof. Metzler-Nolte geleiteten Abteilung für Bioanorganische Chemie, konnte aufgezeigt werden, dass die Biokonjugation organometallischer Peptidkomplexe einen neuen Ansatz in der Medikamentenentwicklung darstellen kann. Hier berichten wir über die einfache und chemoselektive Reaktion eines Tyrosin-enthaltenden G-Protein-gekoppelten-Rezeptor-(GPCR)-Peptides mit $[\text{Cp}^*\text{Rh}(\text{H}_2\text{O})_3](\text{OTf})_2$ in Wasser bei Raumtemperatur sowie einem pH-Wert von 5–6. In dieser Studie haben wir uns auf die physiologisch-wichtigen GPCR-Peptide $[\text{Tyr}^1]$ -Leu-Enkephalin, $[\text{Tyr}^4]$ -Neurotensin(8-13) und $[\text{Tyr}^3]$ -Octreotide konzentriert. Darüber hinaus haben wir erstmals die Struktur in Lösung des $[\text{Tyr}^3]$ -Octreotides im Komplex mit Cp^*Rh mittels mehrdimensionaler NMR-Spektroskopie bestimmt (siehe obige Abbildung). Schließlich haben wir auch die biologischen Auswirkungen dieser metallorganischen Peptidmodifikation des $[(\eta^6\text{-Cp}^*\text{Rh-Tyr}^1)\text{-Leu-Enkephalin}](\text{OTf})_2$ und des $[(\eta^6\text{-Cp}^*\text{Rh-Tyr}^3)\text{-Octreotide}](\text{OTf})_2$ in Bezug auf die Inhibition des Wachstums von MCF7- und HT29-Krebszellen untersucht.

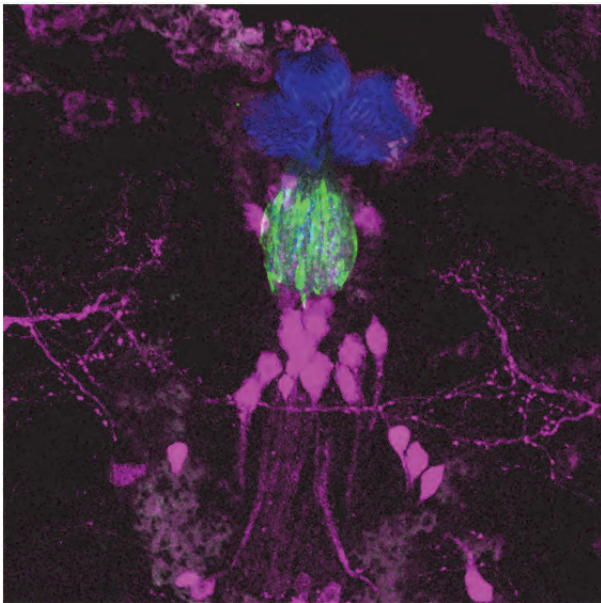
Bernhard Hovemann

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

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

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

A. B. Ziegler, F. Brüsselbach, B. T. Hovemann, *J Comp Neurol*, 2012, Nov 1, DOI: 10.1002/cne.23247 Activity and co-expression of *Drosophila* Black with Ebony in fly optic lobes reveals putative cooperative tasks in vision that evade ERG detection



Ocellar ganglion with photoreceptor cells (blue), post-synaptic cells (magenta) and Black in ocellar glia (green)

Drosophila mutants *black* (*b*) and *ebony* (*e*) show co-operative activity in β -alanyl-dopamine formation of the cuticle. In visual signal transduction Ebony conjugates β -alanine to histamine forming β -alanyl-histamine, or carcinine. Mutation of *ebony* disrupts signal transduction and reveals an electroretinogram (ERG) phenotype. In contrast to the corresponding cuticle phenotype of *black* and *ebony* there is no ERG phenotype observed when *black* expression is disrupted. This discrepancy poses a conundrum to the long-standing assumption of Black and Ebony interaction. The purpose of this study was to investigate the role of Black and Ebony in fly optic lobes. We excluded a presynaptic histamine uptake pathway and confirmed histamine recycling via carcinine formation in glia. β -alanine supply for this pathway is independent of

enzymatic synthesis by Black and β -alanine synthase Pyd3. Black is a specific aspartate decarboxylase with no activity on glutamate. Black expression was localized in lamina glia, in large medulla glia, in glia of the ocellar ganglion and in astrocyte-like glia below the ocellar ganglion. In these glia types Black expression is strictly accompanied by Ebony expression. Activity, localization and strict co-expression with Ebony strongly implicate a specific mode of functional interaction.

Die *Drosophila* Mutanten *black* (*b*) und *ebony* (*e*) zeigen Kooperativität in der Synthese von β -Alanyl-Dopamin in der Kutikula. In der visuellen Signaltransduktion konjugiert Ebony β -Alanin mit Histamin zu β -Alanyl-Histamine (Carcinin). *Ebony*-Mutation unterbricht die Signaltransduktion und zeigt einen ERG Phänotyp. Im Gegensatz zu dem vergleichbaren Kutikula-Phänotyp von *black* und *ebony* zeigt die *black* Mutation keinen ERG Phänotyp. Diese Diskrepanz erscheint rätselhaft gegenüber der Annahme einer Interaktion zwischen Ebony und Black. Wir haben die Rolle von Black und Ebony in den optischen Loben der Fliege untersucht. Wir konnten eine präsynaptische Aufnahme von Histamin ausschließen und bestätigten den Histamin Recycling-Weg über Carcinin Bildung in Glia. Die β -Alanin Zufuhr für diesen Weg ist unabhängig von Black und β -Alanin Synthase Pyd3. Black ist eine spezifische Aspartat Decarboxylase ohne Aktivität an Glutamat. Black Expression wurde in Lamina Glia, in großer Medulla Glia, in Glia des Ocellarganglions und in einer Art Astrozyten Glia unterhalb des Ocellargaglions nachgewiesen. In diesen Glia Arten ist Black Expression durchweg von Ebony Expression begleitet. Aktivität, Lokalisierung und Koexpression mit Ebony legen eine spezifische Art von funktionaler Interaktion nahe.

Katrin Sommer

Lehrstuhl für 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. Kakoschke, S. Schindler, M. Buchwald, A. Russek, A. Schäfer, H. Steff, U. Krupp, *Chemkon* **19** (2012) 3, S.131-136. „Wie ein Forscher sein“ – das didaktische Konzept für eine Bildungsinitiative in einem Forschungsunternehmen und dessen Umsetzung.

„Forscherwelt“ ist eine von Henkel ins Leben gerufene Bildungsinitiative, die besonders Kinder im Grundschulalter für Naturwissenschaften begeistern will. In dem außerschulischen Lernort am Henkel-Standort Düsseldorf experimentieren die Kinder zu Themen wie Kleben, Waschen oder Körperpflege und gewinnen – unterstützt von den Experten vor Ort – einen authentischen Einblick in das echte Forschungsgeschehen.

Wissenschaftliche Grundlage des von uns entwickelten didaktischen Konzeptes der Forscherwelt bildet das Konstrukt der naturwissenschaftlichen Grundbildung. Dabei zielt das didaktische Konzept auf folgende Elemente eines naturwissenschaftlichen Forschungsprozesses ab: Wissenschaftliche Methoden und kritisches Nachprüfen, Analyse und Interpretation von Daten, Wissenschaft und Fragen sowie Kreativität. Das Beispiel des fünftägigen Ferienkurses zum Thema Kleben zeigt, wie die Merkmale des didaktischen Konzepts die Gestaltung der einzelnen Projektstage prägen.



Kinder fragen (links) ... und Herr Tore Podola (rechts), ein Experte aus dem Klebstoffbereich, antwortet

“Forscherwelt” is an educational initiative set up by Henkel to introduce children up to the age of 10 into the fascinating world of science. The name roughly means “Research World”. In a laboratory especially designed for their needs children have the opportunity to become little researchers and to get hands-on experience in research related to adhesives, detergents and cosmetics. They can put their questions directly to real experts while at the same time gaining an authentic insight into the adult world of work. The didactic concept of “Forscherwelt” is linked to the idea of scientific literacy. The concept includes the following elements: Scientific methods, the ability to identify questions and to draw evidence based conclusions, analytical skills and creativity. These elements build the frame of the course programs (five days 9 am to 4 pm) as demonstrated in the article by the example of the “Adhesive” course.

Exzellenzcluster RESOLV

RESOLV Office; NC02/30, Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224374; FAX: ++49-(0)234-3214027

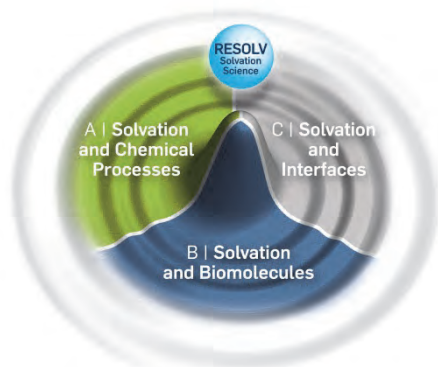
email: resolv@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/solvation>



Die Verteidigung der Anträge der RUB im Rahmen der Exzellenzinitiative war im Fokus im Frühjahr 2012. Das RD IFSC war besonders aktiv für das Zukunftskonzept der Ruhr-Universität und den Exzellenzclusterantrag. Das Team um Frau Prof. Dr. Martina Havenith-Newen war erfolgreich, so dass der Exzellenzcluster RESOLV (Ruhr Explores Solvation; EXC 1069, gefördert von der DFG) positiv begutachtet wurde und das Projekt im November 2012 gestartet ist.

Lösungsmittel spielen eine zentrale Rolle in chemischen, industriellen und pharmazeutischen Prozessen. Das bekannteste Lösungsmittel (Solvens) – Wasser – wird aufgrund seiner fundamentalen Bedeutung auch als „Stoff des Lebens“ bezeichnet. Die meisten chemischen Reaktionen, wichtige industrielle Prozesse und nahezu alle biologischen Vorgänge finden in flüssiger Phase statt. Bisher sind jedoch Solvatationsprozesse molekular kaum verstanden.

Daher untersuchen die über 40 Wissenschaftler von RESOLV die Solvation, das Lösen einer chemischen Substanz, und betrachten Solvensmoleküle als funktionelle Einheiten, die eine aktive Rolle spielen und nicht nur passive Beobachter im Lösungsprozess sind.



The defense of the proposals submitted to the excellence initiative by RUB was in focus in spring 2012. The RD IFSC was particularly supporting the Research Campus RUB and the Cluster of Excellence proposal. The team around Prof. Dr. Martina Havenith-Newen was successful. The Cluster of Excellence RESOLV (Ruhr Explores Solvation; EXC 1069, funded by the DFG) was positively evaluated and started in November 2012.

Solvents play a central role in chemical, industrial and pharmaceutical processes. best known solvent - water - is ubiquitous solvent and is sometimes even called the “matrix of life”. Most chemical reactions, important industrial and almost all biological processes take place in liquid phase. To date solvation processes are nor really understood at a molecular level. Thus, the more than 40 researchers of RESOLV are investigating solvation in detail. They consider solvent molecules to be functional and employed as active species or reactive agents, rather than just regarded them as inert and passive spectators.

Forschungsbau ZEMOS

ZEMOS Office; NC02/168, Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224374; FAX: ++49-(0)234-3214027

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

2012 stand ganz im Zeichen der Entwurfs- und Ausführungsplanung für den neuen Forschungsbau.

Dazu hatte der Wissenschaftsrat (WR) im Juli 2011 einen rund 44 Mio. € teuren Forschungsbau zur Genehmigung vorgeschlagen. Mit einer Gesamtnutzfläche von 3.891 Quadratmetern entsteht östlich des ND-Gebäudes das „Zentrum für molekulare Spektroskopie



Administration / Service

ZEMOS Office
■ ZEMOS Office
■ Conference Area / International Faculty (IF)

Core Facilities

■ Synthesis
■ Spectroscopy
■ Simulation

■ Technical Services

Solvation Science

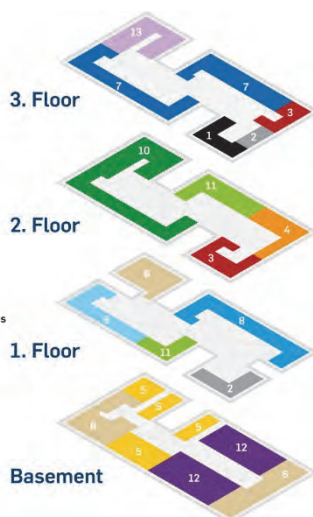
Research Areas / Early Career Researchers Groups
■ Synthesis
■ Spectroscopy
■ Simulation

Transfer Centers

■ CES
■ ACC THz

Special Laboratories

■ Spectroscopy Laboratories
■ Autoclave Laboratories



und Simulation solvensgesteuerter Prozesse“ (ZEMOS), in dem rund 100 Wissenschaftler untergebracht werden. Mit ZEMOS wird eine national einzigartige und international herausragende Institution für Solvation Science an der RUB errichtet. Es werden drei Core Facilities geschaffen werden, die jeweils eine spezifische Technologieplattform für die Wissenschaftler zur Verfügung stellen. Der Bau- und Liegenschaftsbetrieb (BLB) NRW, Niederlassung Dortmund, ist Bauherr des Forschungsgebäudes ZEMOS.

2012 was dedicated to the planning phase of the new Research Building.

The German Science Council (German: Wissenschaftsrat (WR)) recommended the funding of a 44 M€ research building. With a total area of 3.891 square meters, the Center of Molecular Spectroscopy and Simulation of Solvent driven Processes (ZEMOS) will be created eastward of the ND building. It will give space to about 100 scientists. ZEMOS will become a national unique and internationally leading institution for Solvation Science at the Ruhr-Universität Bochum. There will be three Core Facilities, each of which will provide a specific technology platform for the scientists. The „Bau- und Liegenschaftsbetrieb (BLB) NRW“, branch Dortmund, is the awarding authority for the research building ZEMOS.

RUHR
UNIVERSITÄT
BOCHUM

RUB



Bau- und Liegenschaftsbetrieb NRW
Dortmund



Forscherguppe 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.rub.de/for630/>

Die *Bioorganometallchemie* ist ein aktuelles, interdisziplinäres Arbeitsgebiet. Diese Forschergruppe hat das Ziel, die Organometallchemie in der medizinischen Chemie zu etablieren. Der wissenschaftliche Schwerpunkt der Forschergruppe zielt auf das umfassende Verständnis der Wechselwirkung ausgewählter Klassen von Organometallverbindungen mit ihren zellulären Zielstrukturen wie Rezeptoren, Proteinen und DNA. Dabei sollen metallspezifische Wirkmechanismen aufgeklärt werden. Diese Erkenntnisse fließen in das Design neuer Leitstrukturen ein und tragen zum Verständnis von Signalwegen und Proteinexpressionsmustern in Tumorzellen bei. Die neun teilnehmenden Gruppen in dieser von der DFG seit 2006 geförderten ortsverteilten Forschergruppe haben im Jahr 2012 wieder über zehn gemeinsame Publikationen veröffentlicht, seit Beginn der Förderung durch die DFG sind damit über 70 gemeinsame Publikationen erschienen! In Bochum sind an der FOR630 die Gruppen Sheldrick (Analytische Chemie, emeritiert) und Metzler-Nolte (Anorg. Chemie I) beteiligt. Die Förderung der FOR 630 wurde um ein Jahr verlängert und läuft im Jahr 2013 aus.



Bioorganometallic Chemistry is a young and interdisciplinary field of study. This Research Unit ("Forscherguppe") has established 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 the middle of 2013. 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 2011, more than ten joint papers were published from this Research Unit, resulting in a total of >70 joint publications since the beginning of the funding period! Progress in this Research Unit will contribute to the development of medicinal bioorganometallic chemistry in Germany and beyond. Funding of FOR 630 has been extended for one year and will end in 2013.

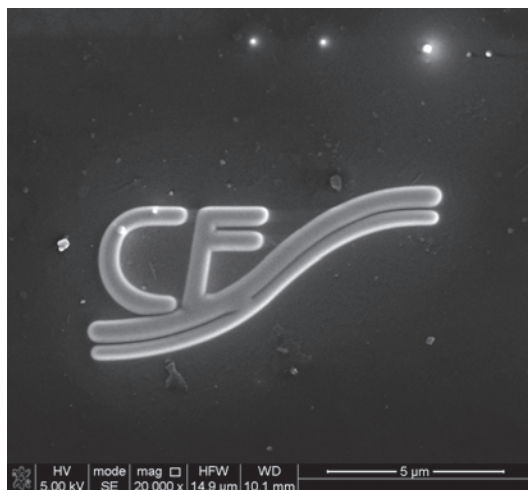


Zentrum für Elektrochemie
Center for Electrochemical Sciences (CES)

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)

Im Zentrum für Elektrochemie der Ruhr-Universität Bochum werden Forschungsarbeiten auf unterschiedlichsten Gebieten der Elektrochemie wie Li-Ionen-Batterien, Halbleiter, Photoelektrochemie, photoelektrochemische Wasserspaltung, Katalysatoren für die Sauerstoff-Reduktion/Oxidation, Brennstoffzellen und Biosensoren durchgeführt. Hierfür steht ein Elektrochemie-Labor ausgerüstet mit hochmodernen Elektrochemie-, Mikroskopie-, und Spektroskopietechniken zur Verfügung. Neben den Aktivitäten der Arbeitsgruppen der Sprecher konnten sich auch drei Nachwuchsgruppen "Molecular Nanostructures" (Dr. Nicolas Plumere), "Semiconductor Electrochemistry and Energy Conversion" (Dr. Fabio La Mantia) und "Adsorption and Electrocatalysis" (Dr. Aliaksandr Bandarenka) etablieren, so dass diese auch nach Auslaufen der Förderung durch das Land NRW und die EU weiter forschen werden. Dr. F. La Mantia konnte eine BMBF-Nachwuchsgruppe zur Entwicklung von wässrigen Lithium-Ionen-Batterien einwerben. Dr. A. Bandarenka ist Partner in der Helmholtz-Energie-Allianz "Stationäre elektrochemische Feststoff-Speicher und -Wandler". CES ist mit den Arbeitsgruppen der Sprecher und der drei Nachwuchsgruppen am Exzellenz-Cluster "RESOLV" und dem Forschungsneubau ZEMOS beteiligt.



At the Center for Electrochemical Sciences (CES) of the Ruhr-Universität Bochum research on different areas of electrochemistry like Li-ion-batteries, semiconductors, photoelectrochemistry, photoelectrochemical water splitting, catalysts for oxygen reduction/oxidation, fuel cells, and biosensors is performed. The core of CES is a central electrochemistry laboratory equipped with modern electrochemical-, microscopic- and spectroscopic techniques. An important outcome of CES is the establishment of the three junior research groups "Molecular Nanostructures" (Dr. Nicolas Plumere), "Semiconductor Electrochemistry and Energy Conversion" (Dr. Fabio La Mantia) and "Adsorption and Electrocatalysis"

(Dr. Aliaksandr Bandarenka) which ensures the continuation of their research work also after the first funding period. Dr. F. La Mantia raised a BMBF young research group for the development of aqueous Li-ion batteries. Dr. A. Bandarenka participates in the Helmholtz-Energie-Allianz "Stationäre elektrochemische Feststoff-Speicher und -Wandler". In addition CES is participating at the Excellence-Cluster "RESOLV" and the new research building ZEMOS.



**Transport and signalling mechanisms in polarized cells
(TRANSPOL). Call: FP7-PEOPLE-ITN-2010
Koordinator: Prof. Dr. Kai Erdmann, Prof. Dr. Rolf
Heumann**



TRANSPOL ist ein interdisziplinäres Netzwerk, *Initial Training Network* (ITN), das junger Wissenschaftler im europäischen Bildungsbereich ausbildet. Thematisch ist TRANSPOL-ITN zwischen Zell- bzw. Molekularbiologie und Membranphysik angesiedelt. Spezielles Ziel ist es, ein molekulares Verständnis des Zusammenhangs zwischen intrazellulären Transportmechanismen und zellulärer Signalweiterleitung zu erwerben und deren mögliche Relevanz für das Verständnis menschlicher Krankheiten zu erkennen. Ein vollständiges Verständnis der komplexen Vorgänge der Endozytose, des intrazellulären Transports und der Signalweiterleitung, die an der Schnittstelle zwischen Membran und Zytoplasma stattfinden, impliziert die Erforschung von mechanischen und dynamischen Aspekten mittels membranphysikalischer Methoden. Somit erfordert dieses Vorgehen die kombinierte Expertise aus den Bereichen der Zell- bzw. Molekularbiologie und der Physik. TRANSPOL verbindet genau diese Gebiete des Fachwissens in einem gemeinsamen Ausbildungsprogramm. Dabei werden Spezialisten aus dem akademischen Bereich und der Privatwirtschaft gleichberechtigt zusammengeführt.

Die wissenschaftlichen Ziele konzentrieren sich auf ein besseres Verständnis der Ligand/Rezeptor-vermittelten Mechanismen der Signalweiterleitung über die Membran, der Schnittstelle zwischen Lipiden und Proteinen bei der Endozytose, der Signaleigenschaften von Endosomen in der normalen Zelle inklusive der möglicherweise defekten Mechanismen beim *Trafficking* und Signalweiterleitung bei Krankheiten. TRANSPOL wird junge Forscher in der Handhabung von neuartigen photophysikalischen Technologien ausbilden, wie die Anwendung des optischen *stretcher* und der optischen Pinzetten, sowie Mikro-Rheologie zusammen mit Computersimulationen, *Atomic Force Microscopy* und hochauflösende STED Mikroskopie. Damit sollen die grundlegenden Mechanischen und dynamischen Eigenschaften der Lipid-Membran-Wechselwirkung erforscht werden. Darüber hinaus bietet TRANSPOL eine gründliche Ausbildung in den Bereichen der Zellbiologie, Protein- und Lipid-Biochemie, des Protein-Designs und der Systembiologie.

TRANSPOL-ITN ist ein international angesiedeltes Ausbildungsnetzwerk mit 14 Nachwuchsforschern (für 36 Monate) und einem erfahrenen Forscher (für 24 Monate). TRANSPOL besteht aus 10 Netzwerk Gruppierungen und 4 assoziierten Partnern aus insgesamt sieben verschiedenen Ländern (Deutschland, Frankreich, UK, Polen, Israel, Dänemark, der Schweiz sowie zwei außereuropäischen Ländern: USA, Singapur).

Veröffentlichungen 2012

Anorganische Chemie 1

- M. Wenzel, B. Kohl, D. Münch, N. Raatschen, H. B. Albada, L. Hamoen, N. Metzler-Nolte, H.-G. Sahl, J. E. Bandow, *Antimicrob. Agents Chemother.* **56** (2012) 5749–5757. Proteomic response of *Bacillus subtilis* to Lantibiotics Reflects differences in interaction with the cytoplasmic membrane
- M. Strack, S. Langklotz, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, H. B. Albada, *J. Org. Chem.* **77** (2012) 9954–9958. Silyl-Based Alkyne-Modifying Linker for the Preparation of C-Terminal Acetylene-Derivatized Protected Peptides
- C. G. Hartinger, N. Metzler-Nolte, P. J. Dyson, *Organometallics* **31** (2012) 5677–5685. Challenges and Opportunities in the Development of Organometallic Anticancer Drugs
- M. Patra, G. Gasser, N. Metzler-Nolte, *Dalton Trans.* **41** (2012) 6350–6358; DOI: 10.1039/C2DT12460B. Small Organometallic Compounds as Antibacterial Agents
- G. Gasser, N. Metzler-Nolte, *Curr. Opinion Chem. Biol.* **16** (2012) 84–91. DOI: 10.1016/j.cbpa.2012.01.013. The Potential of Organometallic Complexes in Medicinal Chemistry
- H. B. Albada, A.-I. Chiriac, M. Wenzel, M. Penkova, J. E. Bandow, H.-G. Sahl, N. Metzler-Nolte, *Beilstein J. Org. Chem.* **8** (2012) 1753–1764. Modulating the activity of short arginine-tryptophan containing antibacterial peptides with N-terminal metallocenoyl groups
- M. Maschke, M. Lieb, N. Metzler-Nolte, *Eur. J. Inorg. Chem* (**2012**) 5953–5959. Biologically Active Trifluoromethyl-substituted Metallocene Triazoles: Characterization, Electrochemistry, Lipophilicity, and Cytotoxicity
- B. Fränzel, M. Penkova, C. Frese, N. Metzler-Nolte, D. A. Wolters, *Proteomics* **12** (2012) 2319–2330. *Escherichia coli* exhibits a membrane-related response to a small arginine- and tryptophan-rich antimicrobial peptide
- H. B. Albada, P. Prochnow, S. Bobersky, S. Langklotz, P. Schriek, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *ACS Med. Chem. Lett.* **3** (2012) 980–984. Tuning the Activity of a Short Arg-Trp Antimicrobial Peptide by Lipidation of a C- or N-terminal Lysine Side-Chain
- A. Gross, N. Hüsken, J. Schur, L. Raszeja, I. Ott, N. Metzler-Nolte, *Bioconjugate Chem.* **23** (2012) 1764–1774; A Ruthenocene-PNA bioconjugate – synthesis, characterization, cytotoxicity and AAS-detected cellular uptake
- H. B. Albada, F. Wieberneit, I. Dijkgraaf, J. H. Harvey, J. L. Whistler, R. Stoll, N. Metzler-Nolte, R. H. Fish, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012) 10321–10324. The Chemoselective Reactions of Tyrosine-Containing G-Protein-Coupled. Receptor Peptides with $[\text{Cp}^*\text{Rh}(\text{H}_2\text{O})_3](\text{OTf})_2$, Including 2D NMR Structures and the Biological Consequences
- N. Yamamoto, N. S. Bryce, N. Metzler-Nolte, T. W. Hambley, *Bioconjugate Chem.* **23** (2012) 1110–1118. Effects of Enzymatic Activation on the Distribution of Fluorescently Tagged MMP-2 Cleavable Peptides in Cancer Cells and Spheroids
- S. D. Köster, H. Alborzinia, S. Can, I. Kitanovic, S. Wölfl, R. Rubbiani, I. Ott, P. Riesterer, A. Prokop, K. Merz, N. Metzler-Nolte, *Chem. Sci.* **3** (2012) 2062–2072. A Spontaneous Gold(I)-Azide Alkyne Cycloaddition Reaction Yields Gold-Peptide

Bioconjugates which Overcome Cisplatin Resistance in a p53-Mutant Cancer Cell Line

- L. Gaviglio, A. Gross, N. Metzler-Nolte, M. Ravera, *Metallomics* **4** (2012) 260–266. Synthesis and *in vitro* cytotoxicity of cis,cis,trans-diamminedichloridosuccinato-platinum(IV)-peptide bioconjugates
- S.y Abramkin, S. M. Valiahdi, M. A. Jakupc, M. Galanski, N. Metzler-Nolte, B. K. Keppler, *Dalton. Trans.* **41** (2012) 3001–3005. Solid-phase synthesis of oxaliplatin–TAT peptide bioconjugates
- M. Patra, G. Gasser, M. Wenzel, K.s Merz, J. E. Bandow, N.s Metzler-Nolte, *Organometallics* (2012). Sandwich and Half-Sandwich Derivatives of Platensimycin: Synthesis and Biological Evaluation
- G. Gasser, A. Pinto, S. Neumann, A. M. Sosniak, M. Seitz, K. Merz, R. Heumann, N. Metzler-Nolte, *Dalton Trans.* **41** (2012) 2304–2313. Synthesis, Characterisation and Bioimaging of a Fluorescent Rhenium-Containing PNA Bioconjugate
- N. S. Hüsken, M. Gebala, F. La Mantia, W. Schuhmann, N. Metzler-Nolte. *ChemPhysChem* **13** (2012) 131–139. Impact of Single Basepair Mismatches on Electron-Transfer Processes at Fc-PNA•DNA Modified Gold Surfaces
- M. Patra, K. Merz, N. Metzler-Nolte, *Dalton Trans.* **41** (2012) 112–117. Planar Chiral (η^6 -arene)Cr(CO)₃ Containing Carboxylic Acid Derivatives: Synthesis and Use in the Preparation of Organometallic Analogues of the Antibiotic Platensimycin
- A. Kupka, V.Vasylyeva, D. W. M. Hofmann, K. V. Yusenko, K. Merz, *Crystal Growth & Design* **12** (12) (2012), 5966–5971, Database: CAPLUS, DOI:10.1021/cg300959w. Solvent and Isotopic Effects on Acridine and Deuterated Acridine Polymorphism
- O. V. Shishkin, S. V Shishkina, A. V. Maleev, R. I. Zubatyuk, V. Vasylyeva, K. Merz, *ChemPhysChemAhead of Print*. Database: CAPLUS, DOI:10.1002/cphc.201200581. Influence of Deuteration and Fluorination on the Supramolecular Architecture of Pyridine N-Oxide Crystals
- V. Vasylyeva, O. V. Shishkin, A. V. Maleev, K. Merz, *Crystal Growth & Design* **12** (2) (2012), 1032–1039, Database: CAPLUS, DOI:10.1021/cg201623e. Crystal Structures of Fluorinated Pyridines from Geometrical and Energetic Perspectives
- W.Hu, K. Splith, I. Neundorf, K. Merz, U. Schatzschneider, *JBIC* **17** (2) (2012), 175–185, Database: CAPLUS, DOI:10.1007/s00775-011-0840-5. Influence of the metal center and linker on the intracellular distribution and biological activity of organometal-peptide conjugates
- H. Noei, A. Birkner, K. Merz, M. Muhler, Y. Wang, *J. Phys. Chem. C* **116** (20), (2012), 11181–11188, Database: CAPLUS, DOI:10.1021/jp302723r. Probing the Mechanism of Low-Temperature CO Oxidation on Au/ZnO Catalysts by Vibrational Spectroscopy
- C. Doffek, N. Alzakhem, M. Molon, M. Seitz, *Inorg. Chem.* **51** (2012) 4539–4545. Rigid, Perdeuterated Lanthanoid Cryptates – Extraordinarily Bright Near-IR Luminophores
- N. Alzakhem, C. Bischof, M. Seitz, *Inorg. Chem.* **51** (2012) 9343–9349. The Dependence of the Photophysical Properties on the Number of 2,2'-Bipyridine Units in a Series of Luminescent Europium and Terbium Cryptates

- J. Scholten, G. A. Rosser, J. Wahsner, N. Alzakhem, C. Bischof, F. Stog, A. Beeby, M. Seitz, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012) 13915-13917. Anomalous Reversal of C–H and C–D Quenching Efficiencies in Luminescent Praseodymium Cryptates
- C. Doffek, N. Alzakhem, C. Bischof, J. Wahsner, T. Güden-Silber, J. Lügger, C. Platas-Iglesias, M. Seitz, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012) 16413-16423. Understanding the Quenching Effects of Aromatic C-H- and C-D-Oscillators in Near-IR Lanthanoid Luminescence

Anorganische Chemie 2

- M. Banerjee, N. B. Srinivasan, H. Z. Zhu, S. J. Kim, K. Xu, M. Winter, H. W. Becker, D. Rogalla, T. de los Arcos, D. Bekermann, D. Barreca, R. A. Fischer, A. Devi, *Cryst. Growth Des.* **12** (2012) 5079-5089. Fabrication of ZrO₂ and ZrN Films by Metalorganic Chemical Vapor Deposition Employing New Zr Precursors.
- M. Banerjee, N. B. Srinivasan, H. Z. Zhu, S. J. Kim, K. Xu, M. Winter, H. W. Becker, D. Rogalla, T. de los Arcos, D. Bekermann, D. Barreca, R. A. Fischer, A. Devi, *Cryst. Growth Des.* **12** (2012) 5079-5089. Fabrication of ZrO₂ and ZrN Films by Metalorganic Chemical Vapor Deposition Employing New Zr Precursors.
- D. Bekermann, A. Gasparotto, D. Barreca, C. Maccato, E. Comini, C. Sada, G. Sberveglieri, A. Devi, R. A. Fischer, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **4** (2012), 928-934. Co₃O₄/ZnO Nanocomposites: From Plasma Synthesis to Gas Sensing Applications.
- A. Betard, H. Bux, S. Henke, D. Zacher, J. Caro, R. A. Fischer, *Microporous Mesoporous Mat.* **2012**, 150, 76-82. Fabrication of a CO₂-selective membrane by stepwise liquid-phase deposition of an alkylether functionalized pillared-layered metal-organic framework [Cu₂L₂P]_n on a macroporous support.
- A. Betard, R. A. Fischer, *Chem. Rev.* **112** (2012) 1055-1083. Metal-Organic Framework Thin Films: From Fundamentals to Applications.
- A. Betard, S. Wannapaiboon, R. A. Fischer, *Chem. Commun.* **48** (2012) 10493-10495. Assessing the adsorption selectivity of linker functionalized, moisture-stable metal-organic framework thin films by means of an environment-controlled quartz crystal microbalance.
- T. Bollermann, M. Molon, C. Gemel, K. Freitag, R. W. Seidel, M. von Hopffgarten, P. Jerabek, G. Frenking, R. A. Fischer, *Chem.-Eur. J.* **18** (2012) 4909-4915. Oligonuclear Molecular Models of Intermetallic Phases: A Case Study on [Pd₂Zn₆Ga₂(Cp*)₅(CH₃)₃].
- T. Bollermann, C. Gemel, R. A. Fischer, *Coord. Chem. Rev.* **256** (2012) 537-555. Organozinc ligands in transition metal chemistry.
- T. de los Arcos, S. Cwik, A. P. Milanov, V. Gwildies, H. Parala, T. Wagner, A. Birkner, D. Rogalla, H. W. Becker, J. Winter, A. Ludwig, R. A. Fischer, A. Devi, *Thin Solid Films* **522** (2012) 11-16. Influence of process parameters on the crystallinity, morphology and composition of tungsten oxide-based thin films grown by metalorganic chemical vapor deposition.
- S. Gonzalez-Gallardo, T. Bollermann, R. A. Fischer, R. Murugavel, *Chem. Rev.* **112** (2012) 3136-3170. Cyclopentadiene Based Low-Valent Group 13 Metal Compounds: Ligands in Coordination Chemistry and Link between Metal Rich Molecules and Intermetallic Materials.

- S. Henke, A. Schneemann, A. Wutscher, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012) 134, 9464-9474. Directing the Breathing Behavior of Pillared-Layered Metal Organic Frameworks via a Systematic Library of Functionalized Linkers Bearing Flexible Substituents.
- S. Henke, A. Schneemann, S. Kapoor, R. Winter, R. A. Fischer, *J. Mater. Chem.* **22** (2012) 909-918. Zinc-1,4-benzenedicarboxylate-bipyridine frameworks – linker functionalization impacts network topology during solvothermal synthesis.
- S. B. Kalidindi, H. Oh, M. Hirscher, D. Esken, C. Wiktor, S. Turner, G. Tendeloo, R. A. Fischer, *Chem.-Eur. J.* **18** (2012) 10848-10856. Metal@COFs: Covalent Organic Frameworks as Templates for Pd Nanoparticles and Hydrogen Storage Properties of Pd@COF-102 Hybrid Material.
- O. Kozachuk, K. Khaletskaia, M. Halbherr, A. Betard, M. Meilikhov, R. W. Seidel, B. Jee, A. Poppl, R. A. Fischer, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2012**, 1688-1695. Microporous Mixed-Metal Layer-Pillared $[Zn_{1-x}Cu_x(bdc)(dabco)_{0.5}]$ MOFs: Preparation and Characterization.
- B. Liu, O. Shekhah, H. K. Arslan, J. X. Liu, C. Woll, R. A. Fischer, *Angew. Chem.-Int. Edit.* **51** (2012) 807-810. Enantiopure Metal-Organic Framework Thin Films: Oriented SURMOF Growth and Enantioselective Adsorption.
- R. Meyer, S. Hamann, M. Ehmman, S. Thienhaus, S. Jaeger, T. Thiede, A. Devi, R. A. Fischer, A. Ludwig, *ACS Comb. Sci.* **14** (2012) 531-536. Microgradient-Heaters As Tools for High-Throughput Experimentation.
- A. S. Münch, M. S. Lohse, S. Hausdorf, G. Schreiber, D. Zacher, R. A. Fischer, F. Mertens, *Microporous Mesoporous Mat.* **159** (2012) 132-138. Room temperature preparation method for thin MOF-5 films on metal and fused silica surfaces using the controlled SBU approach.
- R. Nayuk, D. Zacher, R. Schweins, C. Wiktor, R. A. Fischer, G. van Tendeloo, K. Huber, *J. Phys. Chem. C* **2012**, *116*, 6127-6135. Modulated Formation of MOF-5 Nanoparticles-A SANS Analysis.
- H. Noei, S. Amirjalayer, M. Muller, X. N. Zhang, R. Schmid, M. Muhler, R. A. Fischer, Y. M. Wang, *Chemcatchem* **4** (2012) 755-759. Low-Temperature CO Oxidation over Cu-Based Metal-Organic Frameworks Monitored by using FTIR Spectroscopy.
- Q. Simon, D. Barreca, A. Gasparotto, C. Maccato, E. Tondello, C. Sada, E. Comini, G. Sberveglieri, M. Banerjee, K. Xu, A. Devi, R. A. Fischer, *ChemPhysChem* **13** (2012) 2342-2348. CuO/ZnO Nanocomposite Gas Sensors Developed by a Plasma-Assisted Route.
- Q. Simon, D. Barreca, A. Gasparotto, C. Maccato, E. Tondello, C. Sada, E. Comini, A. Devi, R. A. Fischer, *Nanotechnology* **23** (2012) 025502. Ag/ZnO nanomaterials as high performance sensors for flammable and toxic gases.
- M. A. Sliem, D. A. Schmidt, A. Betard, S. B. Kalidindi, S. Gross, M. Havenith, A. Devi, R. A. Fischer, *Chem. Mat.* **24** (2012) 4274-4282. Surfactant-Induced Nonhydrolytic Synthesis of Phase-Pure ZrO₂ Nanoparticles from Metal-Organic and Oxocluster Precursors.
- M. A. Sliem, S. Turner, D. Heeskens, S. B. Kalidindi, G. Van Tendeloo, M. Muhler, R. A. Fischer, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 8170-8178. Preparation, microstructure characterization and catalytic performance of Cu/ZnO and ZnO/Cu composite nanoparticles for liquid phase methanol synthesis.

- C. Wiktor, S. Turner, D. Zacher, R. A. Fischer, G. Van Tendeloo, *Microporous Mesoporous Mat.* **162** (2012), 131-135. Imaging of intact MOF-5 nanocrystals by advanced TEM at liquid nitrogen temperature.
- K. Xu, R. Ranjith, A. Laha, H. Parala, A. P. Milanov, R. A. Fischer, E. Bugiel, J. Feydt, S. Irsen, T. Toader, C. Bock, D. Rogalla, H. J. Osten, U. Kunze, A. Devi, *Chem. Mat.* **24** (2012) 651-658. Atomic Layer Deposition of Gd₂O₃ and Dy₂O₃: A Study of the ALD Characteristics and Structural and Electrical Properties.

Anorganische Chemie 3

- A.S.R. Chesman, M. Yang, B. Mallick, T.M. Ross, I.A. Gass, G.B. Deacon, S.R. Batten, A.-V. Mudring, *Chem. Commun.* **48** (2012) 124-126. Melting point suppression in new lanthanoid(III) ionic liquids by trapping of kinetic polymorphs: an *in situ* synchrotron powder diffraction study.
- T. Alammar, O. Shekhah, A.-V. Mudring, *J. Mater. Chem.* **22** (2012) 18252-18260. Ultrasound-assisted synthesis of mesoporous β -Ni(OH)₂ and NiO-nano-sheets using ionic liquids.
- B. Mallick, A. Melten, M. Nieuwenhuyzen, R.-D. Rogers, A.-V. Mudring, *Inorg. Chem.* **51** (1) (2012) 193-200. Mercuric Ionic Liquids: [C_nmim][HgX₃], Where n = 3, 4 and X = Cl, Br
- G. Wang, M. Valldor, C. Lorbeer, A.-V. Mudring, *Eur. J. Inorg. Chem.* **18** (2012) 3032-3038. Ionothermal Synthesis of the First Luminescent Open-Framework Manganese Borophosphate with Switchable Magnetic Properties.
- C. Seidel, C. Lorbeer, J. Cybińska, A.-V. Mudring, U. Ruschewitz, *Inorg. Chem.* **51** (8) 4679-4688. Lanthanide Coordination Polymers with Tetrafluoroterephthalate as a Bridging Ligand: Thermal and Optical Properties.
- T. Bäcker, A.-V. Mudring, *Crystals* **2** (2012) 110-117. Betaine Chloride-Betaine Tetrachloridoferrate(III)—An Ionic Liquid Related Crystal Structure Governed by the Pearson Concept.
- S. Schlamp, J. Schulten, R. Betz, T. Bauch, A.-V. Mudring, B. Weber, *Z. anorg. allg. Chem.* **638** (2012) 1093-1102. Synthesis of Anionic Spin Crossover Complexes with Schiff Base like Ligands.
- A.S.R. Chesman, M. Yang, N.D. Spiccia, G.B. Deacon, S.R. Batten, A.-V. Mudring, *Chem. Eur. J.* **18** (2012) 9580-9589. Lanthanoid-Based Ionic Liquids Incorporating the Dicyanonitrosomethanide Anion.
- C. Rustige, M. Brühmann, S. Steinberg, E. Meyer, K. Daub, S. Zimmermann, M. Wolberg, A.-V. Mudring, G. Meyer, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **638** (2012) 1922-1931. The Prolific {ZR₆}X₁₂R and {ZR₆}X₁₀ Structure Types with Isolated Endohedrally Stabilized (Z) Rare-Earth Metal (R) Cluster Halide (X) Complexes.
- C. Lorbeer, J. Cybinska, A.-V. Mudring, *J. Mater. Chem.* **22** (2012) 9505-9508. Phosphate protected fluoride nano-phosphors.

Organische Chemie 1

- P. Wagler, U. Tangen, T. Maeke, J. S. McCaskill *Biosystems* **109** (2012) 2-17. Field programmable chemistry: Integrated chemical and electronic processing of informational molecules towards electronic chemical cells.

- J. S. McCaskill, G. v. Kiedrowski, J. Oehm, P. Mayr, L. Cronin, I. Willner, A. Herrmann, S. Rasmussen, F. Stepanek, N.H. Packard, P. Wills *IJUC* **8** (2012) 289-299. Microscale Chemically Reactive Electronic Agents.
<http://www.oldcitypublishing.com/IJUC/IJUCcontents/IJUCv8n4contents.html>
- J.S. McCaskill, Public web report on the ECCell project Electronic Chemical Cells (2012). <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ECCell/>

Organische Chemie 2

- S. Henkel, Y. Huynh, P. Neuhaus, M. Winkler, W. Sander, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012), 13204-13207. Tunneling Rearrangement of 1-Azulenylcarbene
- S. V. Chapyshev, D. V. Korchagin, M. F. Budyka, T. N. Gavrishova, P. Neuhaus, W. Sander, *ChemPhysChem.* **13** (2012), 2721-2728. EPR Studies on Branched High-Spin Arylnitrenes
- D. Grote, C. Finke, P. Neuhaus, W. Sander, *Eur. J. Org. Chem.* **2012** (2012), 3229-3236. Matrix Isolation and Spectroscopic Characterization of 2,5,6-Trifluoropyridylnitren-3-yl
- W. Sander, S. Roy, I. Polyak, J. M. Ramirez-Anguita, E. Sanchez-Garcia, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012), 8222-8230. The Phenoxyl Radical-Water Complex-A Matrix Isolation and Computational Study
- X. Zeng, H. Beckers, P. Neuhaus, D. Grote, W. Sander, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **638** (2012), 526-533. Elusive Fluoro Sulfinyl Nitrite, FS(O)NO, Produced by Photolysis of Matrix-isolated FS(O)2N
- C. Finke, D. Grote, R. W. Seidel, S. V. Chapyshev, W. Sander, *J. Phys. Org. Chem.* **25** (2012), 486-492. Matrix isolation and IR spectroscopic characterization of 3,5-difluoropyridyl-2,4,6-trinitrene
- A. Mardyukov, W. Sander, *Encyclopedia of Radicals in Chemistry, Biology and Materials*, **1** (2012), 207-228.

Physikalische Chemie 1

- F. Kalkan, Ch. Zaum, K. Morgenstern, *Rev. Sci. Instrum.* **83** (2012) 103903-1-13. A scanning tunneling microscope with a scanning range from hundreds of micrometers down to nanometer resolution.
- F. Kalkan, M. Mehlhorn, K. Morgenstern, *J. Phys.: Condens. Matter* **24** (2012) 394010-1-394010-5. A switch based on self-assembled thymine.
- F. Matthaiei, S. Heidorn, K. Boom, C. Bertram, A. Safiei, J. Henzl, K. Morgenstern, *J. Phys.: Condens. Matter* **24** (2012) 354006-1 – 354006-6. Coulomb attraction during the carpet growth mode of NaCl.
- J. Henzl, P. Puschnig, C. Ambrosch-Draxl, A. Schaate, B. Ufer, P. Behrens, K. Morgenstern, *Phys. Rev. B* **85** (2012) 035410-1 -035410-5. Photoisomerization for a molecular switch in contact with a surface.
- X. Ge, K. Morgenstern, *Phys. Rev. B* **85** (2012) 045417-1 - 045417-7. Ehrlich-Schwoebel barrier and interface-limited decay in island kinetics on Ag(100).
- T. de los Arcos, S. Cwik, A.P. Milanov, V. Gwildies, H. Parala, T. Wagner, A. Birkner, D. Rogalla, H.W. Becker, J. Winter, A. Ludwig, R.A. Fischer, A. Devi, *Thin Solid Films* **522** (2012) 11-16. Influence of process parameters on the crystallinity,

morphology and composition of tungsten oxide-based thin films grown by metalorganic chemical vapor deposition.

- M.I. Muglali, A. Bashir, A. Birkner, M. Rohwerder, *J. Mater. Chem.* **22** (2012) 14337-14340. Hydrogen as an optimum reducing agent for metallization of self-assembled monolayers.
- H. Noei, A. Birkner, K. Merz, M. Muhler, Y. Wang, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 11181–11188. Probing the mechanism of low-temperature CO oxidation on Au/ZnO catalysts by vibrational spectroscopy
- M. Xu, H. Noei, K. Kink, M. Muhler, Y. Wang, Ch. Wöll, *Angew. Chem.* **124** (2012) 4810-4813. Anwendung des oberflächenwissenschaftlichen Ansatzes auf Reaktionen an Oxidpulvern: die Bedeutung der IR-Spektroskopie
- M. Xu, H. Noei, K. Kink, M. Muhler, Y. Wang, Ch. Wöll, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51** (2012) 4731-4734. The surface science approach for understanding reactions on oxide powders: The importance of IR spectroscopy
- H. Noei, S. Amirjalayer, M. Muller, X. Zhang, R. Schmid, M. Muhler, R. Fischer, Y. Wang, *ChemCatChem*. **4** (2012) 755-759. Low-temperature CO oxidation over Cu-based metal-organic frameworks monitored by using FTIR spectroscopy
- M. Xu, H. Noei, M. Buchholz, M. Muhler, Ch. Wöll, Y. Wang, *Catal. Today* **182** (2012) 12-15. Dissociation of formic acid on anatase TiO₂(101) probed by vibrational spectroscopy
- M. I. Muglali, J. X. Liu, A. Baschir, D. Borissov, M. Xu, Y. Wang, Ch. Wöll, M. Rohwerder, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 4703–4712. On the complexation kinetics for metallization of organic layers: palladium onto a pyridine-terminated araliphatic thiol film
- P. St. Petkov, G. N. Vayssilov, J. Liu, O. Shekhah, Y. Wang, C. Wöll, T. Heine, *ChemPhysChem*. **14** (2012) 2025–2029. Defects in MOFs: A thorough characterization
- A. Devi, S. Cwik, K. Xu, A.P. Milanov, H. Noei, Y. Wang, D. Barreca, J. Meijer, D. Rogalla, D. Kahn, R. Cross, H. Parala, S. Paul, *Thin Solid Films* **520** (2012) 4512–4517. Rare-earth substituted HfO₂ thin films grown by metalorganic chemical vapor deposition
- M. Wehner, S. Kunzelmann, C. Herrmann, *FEBS J.* **279** (2012) 203-210. The guanine cap of human guanylat-binding protein 1 is responsible for dimerization and self-activation of GTP hydrolysis
- H. Weingärtner, C. Cabrele, C. Herrmann, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 415-426. How ionic liquids can help to stabilize native proteins
- A. Syguda, A. Kerstan, T. Ladnorg, F. Stüben, C. Wöll, C. Herrmann, *Langmuir* **28** (2012) 6411-6418. Immobilization of biotinylated hGBP1 in a defined orientation on surfaces is crucial for uniform interaction with analyte proteins and catalytic activity
- S. Weibels, A. Syguda, C. Herrmann, H. Weingärtner, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 4635-4639. Steering the enzymatic activity of proteins by ionic liquids. A case study of the enzyme kinetics of yeast alcohol dehydrogenase
- A. Syguda, M. Bauer, U. Benscheid, N. Ostler, E. Naschberger, S. Ince, M. Stürzl, C. Herrmann, *FEBS J.* **279** (2012) 2544-2554. Tetramerisation of human guanylate binding protein 1 is mediated by coiled coil formation of the C-terminal α -helices

- I. C. Rosnizeck, M. Spoerner, T. Harsch, S. Kreitner, D. Filchtinski, C. Herrmann, D. Engel, B. König, H. R. Kalbitzer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51** (2012) 10647-10651. Metal-bis(2-picoly)amine complexes as state 1(T) inhibitors of activated Ras protein
- C. Träger, M. A. Rosenblad, D. Ziehe, C. Garcia-Petit, L. Schrader, K. Kock, C. Vera Richter, B. Klinkert, F. Narberhaus, C. Herrmann, E. Hofmann, H. Aronsson, D. Schünemann, *Plant Cell* **24** (2012) 4819-4836. Evolution from the Prokaryotic to the Higher Plant Chloroplast Signal Recognition Particle: The Signal Recognition Particle RNA Is Conserved in Plastids of a Wide Range of Photosynthetic Organisms

Physikalische Chemie 2

- A. Arora, T.Q. Luong, M. Krüger, Y.J. Kim, C.-H. Nam, A. Manz, M. Havenith, *Analyst* **137** (2012) 575-579. Terahertz-time domain spectroscopy for the detection of PCR amplified DNA in aqueous solution (Cover article).
- S. Funkner, G. Niehues, D.A. Schmidt, M. Heyden, G. Schwaab, K.M. Callahan, D.J. Tobias, M. Havenith, *JACS* **134** (2012) 1030-1035. Watching the low frequency motions in aqueous salt solutions – the terahertz vibrational signatures of hydrated ions.
- D.A. Schmidt, E. Bründermann, M. Havenith, *J. Phys.: Conf. Ser.* **359** (2012) 012015/1-012015/8. Combined far- and near-field chemical nanoscope at ANKA-IR2: applications and detection schemes.
- N. Pérez-Hernández, T.Q. Luong, M. Febles, C. Marco, H.-H. Limbach, M. Havenith, C. Pérez, M.V. Roux, R. Pérez, J. Martín, *J. Phys. Chem. C*, **116(17)** (2012) 9616–9630. The mobility of water molecules through hydrated pores.
- S. Ebbinghaus, K. Meister, M.B. Proghozin, A.L. DeVries, M. Havenith, J. Dzubiella, M. Gruebele, *Biophysical J.* **103(2)** (2012) L20-L22. Functional importance of short-range binding and long-range solvent interactions in helical antifreeze peptides.
- M. Heyden J. Sun, H. Forbert, G. Mathias, M. Havenith, D. Marx, *J. Phys. Chem. Lett.* **3(16)** (2012) 2135-2140. Understanding the origins of dipolar couplings and correlated motion in the vibrational spectrum of water.
- G. Niehues, A.L. Kaledin, J.M. Bowman, M. Havenith, *J. Phys. Chem. B* **116(33)** (2012) 10020-10025. Driving a small solvated peptide in the IR and THz range – A comparative study of energy flow.
- B. Born, I. Sagi, M. Havenith, *Proceedings of SPIE*, **8225** (2012) 822518/1-8225118/7. Water's contribution and enzyme's work – a KITA study.
- J. Soetebier, M. Havenith, *From GIT Labor-Fachzeitschrift* **56(5)** (2012) 342-344. The THz dance of water. Experimental possibilities of THz spectroscopy.
- I. Kopf, H.W. Peindy N'Dongo, F. Ballout, U. Schatzschneider, E. Bründermann, M. Havenith, *Analyst* **137** (2012) 4995-5001. Introducing cymantrene labels into scattering scanning near-field infrared microscopy.
- M.A. Sliem, D.A. Schmidt, A. Betard, S.B. Kalidindi, S. Gross, M. Havenith, A. Devi, R.A. Fischer, *Chem. Mat.* **24(22)** (2012) 4274-4282. Surfactant induced non-hydrolytic synthesis of phase-pure ZrO₂ nanoparticles using metal-organic and oxocluster precursors.
- S. Funkner, M. Havenith, G. Schwaab, *J. Phys. Chem.* **116(45)** (2012) 13374-13380. Urea, a structure breaker? Answers from THz absorption spectroscopy.

- S. Ebbinghaus, K. Meister, M. B. Prigozhin, A. L. DeVries, M. Havenith, J. Dzubiella M. Gruebele, *Biophys. J.* **103** (2012) 20-22. Functional Importance of Short-Range Binding and Long-Range Solvent Interactions in Helical Antifreeze Peptides
- S. Ebbinghaus, A. Dhar, J. Douglas McDonald, M. Gruebele, *US/20120039353*, Particle Dynamics Microscopy using Temperature Jump and Probe Anticorrelation/Correlation Techniques
- E. G. Buchanan, W. H. James III, S. H. Choi, L. Guo, S. H. Gellman, C. W. Müller, T. S. Zwier, *J. Chem. Phys.* **137** (2012) 094301-1–16. Single-conformation infrared spectra of model peptides in the amide I and amide II regions: Experiment-based determination of local mode frequencies and inter-mode coupling
- S. Weibels, S. Syguda, C. Herrmann, et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 4635-4639. Steering the enzymatic activity of proteins by ionic liquids. A case study of the enzyme kinetics of yeast alcohol dehydrogenase.
- H. Weingärtner, C. Cabrele, C. Herrmann, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 415–426. How ionic liquids can help to stabilize native proteins.
- J. Yanping, H. Nadolny, S. Käshammer, et al., *Faraday Discuss.* **154** (2012) 391-407. The ion speciation of ionic liquids in molecular solvents of low and medium polarity.

Analytische Chemie

- M. Gebala, W. Schuhmann, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 14933-14942. Understanding properties of electrified interfaces as a prerequisite for label-free DNA hybridization detection.
- D. Leech, P. Kavanagh, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **84** (2012) 223– 234. Enzymatic fuel cells: Recent progress
- M. Sosna, L. Stoica, E. Wright, J. D. Kilburn, W. Schuhmann, P. N. Bartlett, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 11882-1885. Mass transport controlled oxygen reduction at anthraquinone modified 3D-CNT electrodes with immobilized *Trametes hirsuta* laccase.
- A. R. Zeradjanin, E. Ventosa, A. S. Bondarenko, W. Schuhmann, *ChemSusChem* **5** (2012) 1905-1911. Evaluation of the catalytic performance of gas evolving electrodes using local electrochemical noise measurements
- A. R. Zeradjanin, N. Menzel, P. Strasser, W. Schuhmann, *ChemSusChem* **5** (2012) 1897-1904. The role of water in the chlorine evolution reaction at RuO₂ based electrodes – understanding electrocatalysis as a resonance phenomena
- E. Ventosa, P. Chen, W. Schuhmann, W. Xia, *Electrochem. Commun.* (2012) 132–135. CNTs grown on oxygen-deficient anatase TiO_{2-δ} as high-rate composite electrode material for lithium ion batteries
- J. Masa, K. Ozoemena, W. Schuhmann, J. H. Zagal, *J. Porphyrins Phthalocyanines* **16** (2012) 761–784. Oxygen reduction reaction using N₄-metallomacrocyclic catalysts: fundamentals on rational catalyst design
- Z. Sun, J. Masa, W. Xia, D. König, A. Ludwig, Z.-A. Li, W. Schuhmann, M. Farle, M. Muhler, *ACS Catal.* **2** (2012) 1647–1653. Rapid and surfactant-free synthesis of bimetallic Pt–Cu nanoparticles simply via ultrasound-assisted redox replacement.
- C. Gutiérrez-Sánchez, W. Jia, M. Pita, Y. Beyl, W. Schuhmann, A. L. De Lacey, L. Stoica, *Electrochim. Acta* **82** (2012) 218-223. Enhanced direct electron transfer between laccase and hierarchical carbon microfibers/carbon nanotubes composite electrodes. Comparison of three enzyme immobilization methods

- A. Maleki, D. Nematollahi, J. Henig, N. Plumeré, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **24** (2012) 1932-1936. Electrodeposition of catechol on glassy carbon electrode and its electrocatalytic activity toward NADH oxidation
- M. Huang, J.B. Henry, B.B. Berkes, A. Maljusch, W. Schuhmann, A.S. Bondarenko. Acquisition of impedance and gravimetric data for the characterization of the electrode | electrolyte interfaces, in: *Lecture Notes on Impedance Spectroscopy. Measurement, Modeling and Applications, Volume 3* / Ed. Kanoun, O., CRC Press, Taylor and Francis Group, London, 2012, 35-41.
- A. Maljusch, C. Senöz, M. Rohwerder, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **82** (2012) 339-348. Combined high resolution SKP-SECM investigations for the visualization of local corrosion processes
- A. R. Zeradjanin, F. La Mantia, J. Masa, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **82** (2012) 408-414. Utilization of the catalyst layer of dimensionally stable anodes – interplay of morphology and active surface area
- S. Pöller, Y. Beyl, J. Vivekananthan, D. A. Guschin, W. Schuhmann. *Bioelectrochem.* **87** (2012) 178-184. A new synthesis route for Os-complex modified redox hydrogels for potential biofuel cell applications
- J. J. Santana, M. Pähler, W. Schuhmann, R. M. Souto, *ChemPlusChem* **77** (2012) 707-712, Investigation of copper corrosion inhibition with frequency-dependent alternating-current scanning electrochemical microscopy (4D AC-SECM)
- J. J. Santana, M. Pähler, R. M. Souto, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **77** (2012) 60– 64. Direct evidence of early blister formation in polymer-coated metals from exposure to chloride-containing electrolytes by alternating-current scanning electrochemical microscopy (4D AC-SECM)
- A. Stepanovich, K. Sliozberg, W. Schuhmann, A. Ludwig, *Int. J. Hydrogen Energ.* **37** (2012) 11618-11624. Combinatorial development of nanoporous WO₃ thin film photo-electrodes for solar water splitting by dealloying of binary alloys
- S. Kundu, T. C. Nagaiah., X. Chen., W. Xia, M. Bron, W. Schuhmann, M Muhler, *Carbon* **50** (2012) 4534-4542. Synthesis of an improved hierarchical carbon-fiber composite as a catalyst support for platinum and its application in electrocatalysis
- S. Klink, E. Madej, E. Ventosa, A. Lindner, F. La Mantia, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **22** (2012) 120-123. The importance of cell geometry for electrochemical impedance spectroscopy in three-electrode lithium ion battery test cells.
- J. B. Henry, A. Maljusch, M. Huang, W. Schuhmann, A. S. Bondarenko, *ACS Cat.* **2** (2012) 1457-1460. Thin-film Cu-Pt(111) near-surface alloys: Active electrocatalysts for the oxygen reduction reaction.
- V. Ganga Ramu, A. Bordoloi, T. C. Nagaiah, W. Schuhmann, M. Muhler, C. Cabrele, *Applied Catalysis A: General* **431-432** (2012) 88-94. Copper nanoparticles stabilized on nitrogen-doped carbon nanotubes as efficient and recyclable catalysts for alkyne/aldehyde/cyclic amine A3-type coupling reactions.
- Z. Sun, J. Masa, Z. Liu, W. Schuhmann, M. Muhler, *Chem. Eur. J.* **18** (2012) 6972-6978. Highly concentrated aqueous dispersions of graphene exfoliated by sodium taurodeoxycholate: dispersion behaviour and its potential application as catalyst support for oxygen reduction.
- B. Berkes, G. Inzelt, W. Schuhmann, A. Bondarenko, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 10995-11003. Influence of Cs⁺ on specific adsorption of *OH, *O and *H at platinum in acidic sulfuric media.

- E. Al-Jawadi, S. Pöller, R. Haddad, W. Schuhmann, *Microchim. Acta* **177** (2012) 405-410. Lactate and glucose biosensors based on dehydrogenases entrapped between an electrocatalyst film and redox catalyst-modified polymers.
- R. Gerwig, K. Fuchsberger, B. Schroeppel, G. S. Link, G. Heusel, U. Kraushaar, W. Schuhmann, A. Stett, M. Stelzle, *Frontiers in Neuroengineering* **5** (2012) Article 8. PEDOT-CNT composite microelectrodes for recording and electrostimulation applications: fabrication, morphology and electrical properties.
- R. Chen, V. Trieu, A. R. Zeradjanin, H. Natter, D. Teschner, J. Kintrup, A. Bulan, W. Schuhmann, R. Hempelmann, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 7392–7399. Microstructural impact of anodic coatings on the electrochemical chlorine evolution reactions.
- M. Huang, A. Maljusch, J. B. Henry, W. Schuhmann, A. S. Bondarenko *Electrochem. Commun.* **16** (2012) 92-96. Probing electrode|electrolyte interface during intercalation of Cu into Te.
- S. Grützke, S. Abdali, W. Schuhmann, M. Gebala, *Electrochem. Commun.* **16** (2012) 59-62. Detection of DNA hybridization using electrochemical impedance spectroscopy and surface enhanced Raman scattering
- T. C. Nagaiah, A. Bordoloi, M. D. Sánchez, M. Muhler, W. Schuhmann, *ChemSusChem* **5** (2012) 637-641. Mesoporous nitrogen-rich carbon materials as catalysts for the oxygen reduction reaction
- W. Schuhmann, M. Bron, „Scanning electrochemical microscopy (SECM) in proton exchange membrane fuel cell research and development”, in: Polymer electrolyte membrane and direct methanol fuel cell technology, Volume 2: *In situ* characterization techniques for low temperature fuel cells; Ch. Hartnig, Ch. Roth, Eds., Woodhead Publishing Ltd., Cambridge, 2012, pp. 399-424.
- J. Masa, A. Bordoloi, M. Muhler, W. Schuhmann, W. Xia, *ChemSusChem* **5** (2012) 523-525. Enhanced electrocatalytic stability of Pt nanoparticles supported on a nitrogen-doped composite of carbon nanotubes and mesoporous TiO₂ under oxygen reduction conditions
- A. Schulte, M. Nebel, W. Schuhmann, *Methods in Enzymology* **504** (2012) 237-257 Single live cell topography and activity imaging with the shearforce-based constant-distance scanning electrochemical microscope. (doi: 10.1016/B978-0-12-391857-4.00012-4)
- W. Jia, C. Jin, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, L. Stoica, *Chem. Eur. J.* **18** (2012) 2783-2786. Glucose oxidase/horseradish peroxidase co-immobilized at a CNT-modified graphite electrode - towards potentially implantable biocathodes
- C. Balczun, J. Siemanowski, J. K. Pausch, S. Helling, K. Marcus, C. Stephan, H. E. Meyer, T. Schneider, C. Cizmowski, M. Oldenburg, S. Höhn, C. K. Meiser, W. Schuhmann, G. A. Schaub, *Insect Biochemistry and Molecular Biology* **42** (2012) 240-250. Intestinal aspartate proteases TiCatD and TiCatD2 of the haematophagous bug *Triatoma infestans* (Reduviidae): sequence characterisation, expression pattern and characterisation of proteolytic activity
- E. Ventosa, W. Xia, S. Klink, F. La Mantia, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **65** (2012) 22– 29. Influence of the surface functional groups on the lithium ion intercalation of carbon cloth.

- U. Salaj-Kosla, S. Pöller, Y. Beyl, M. D. Scanlon, S. Beloshapkin, S. Shleev, W. Schuhmann, E. Magner, *Electrochem. Commun.* **16** (2012) 92–95. Direct electron transfer of bilirubin oxidase (*Myrothecium verrucaria*) at an unmodified nanoporous gold biocathode.
- A. Maljusch, J. Henry, W. Schuhmann, A. S. Bondarenko, *Electrochem. Commun.* **16** (2012) 88–91. A quick method of preparation of Pt(111)-like thin films.
- Z. Wang, M. Etienne, S. Pöller, W. Schuhmann, G.-W. Kohring, V. Mamane, A. Walcarius *Electroanalysis* **24** (2012) 376-385. Dehydrogenase-based reagentless biosensors: Electrochemically assisted deposition of sol-gel thin films on functionalized carbon nanotubes.
- C. Senöz, A. Maljusch, W. Schuhmann, M. Rohwerder, *Electroanalysis* **24** (2012) 239-245. SECM and SKPFM studies of the local corrosion mechanism of Al alloys – A pathway to an integrated SKP-SECM system.
- M. Huang, J. B. Henry, B. B. Berkes, A. Maljusch, W. Schuhmann, A. S. Bondarenko. *Analyst* **137** (2012) 631-640. Towards a detailed in situ characterization of non-stationary electrocatalytic systems.
- S. Klink, E. Ventosa, W. Xia, F. La Mantia, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **15** (2012) 10-13. Tailoring of CNT surface oxygen groups by gas-phase oxidation and its implications for lithium ion batteries.
- N. Hüsken, M. Gebala, A. Battistel, F. La Mantia, W. Schuhmann, N. Metzler-Nolte *ChemPhysChem* **13** (2012) 131-139. Impact of single-basepair mismatches on electron-transfer processes at Fc-PNA•DNA modified gold surfaces
- J. Masa, T. Schilling, M. Bron, W. Schuhmann *Electrochim. Acta* **60** (2012) 410-418. Electrochemical synthesis of metal-polypyrrole composites and their activation for electrocatalytic reduction of oxygen by thermal treatment
- A. Rosenhahn, G.H. Sendra, *Biointerphases* **7** (2012) 63. Surface sensing and settlement strategies of marine biofouling organisms
- R. Dronyak, J. Gulden, O.M. Yefanov, A. Singer, T. Gorniak, T. Senkbeil, J.-M. Meijer, A. Al-Shemmary, J. Hallmann, D.D. Mai, T. Reusch, D. Dzhigaev, R.P. Kurta, U. Lorenz, A. V. Petukhov, S. Düsterer, R. Treusch, M.N. Strikhanov, E. Weckert, A.P. Mancuso, T. Salditt, A. Rosenhahn, and I.A. Vartanyants, *Phys. Rev. B* **86** (2012) , 64303. Dynamics of colloidal crystals studied by pump-probe experiments at FLASH
- S. Maleschlijski, G.H. Sendra, A. Di Fino, L. Leal-Taixé, I. Thome, A. Terfort, N. Aldred, M. Grunze, A.S. Clare, B. Rosenhahn, A. Rosenhahn, *Biointerphases* **7** (2012) 50. Three dimensional tracking of exploratory behavior of barnacle cyprids using stereoscopy
- A. Singer, F. Sorgenfrei, A.P. Mancuso , N. Gerasimova, O.M. Yefanov, J. Gulden, T. Gorniak, T. Senkbeil, A. Sakdinawat, Y. Liu, D. Attwood, S. Dziarzhytski, R. Treusch, E. Schneidmiller, E. Weckert, A. Rosenhahn, W. Wurth, I. A. Vartanyants *Optics Express* **20** (2012) 17480. Spatial and temporal coherence properties of single free-electron laser pulses
- I. Thomé, M.E. Pettit, M.E. Callow, J.A. Callow, M. Grunze, A. Rosenhahn *Biofouling* **28** (2012) 501. Conditioning of surfaces by macromolecules and its implication for the settlement of zoospores of the green alga *Ulva*
- S. Weiße, N. Heddergott, M. Heydt, D. Pflästerer, T. Maier, T. Haraszti, M. Grunze, M. Engstler, A. Rosenhahn, *PLoS One* **7** (2012) e37296. A Quantitative 3D Motility Analysis of *Trypanosoma brucei* by Use of Digital In-line Holographic Microscopy

- M. Heydt, M. E. Pettitt, X. Cao, M. E. Callow, J. A. Callow, M. Grunze, A. Rosenhahn, *Biointerphases* **7** (2012) 33. Settlement behavior of zoospores of *Ulva* during surface selection studied by digital holographic microscopy
- G.H. Sendra, S. Weiße, S. Maleschlijski, A. Rosenhahn, *Applied Optics*, **51** (2012) 3416. Hologram reconstruction corrected for measurements through layers of different refractive index in DIHM
- M. Hanke, H.K. Arslan, S. Bauer, O. Zybaylo, C. Christophis, H. Gliemann, A. Rosenhahn, C. Wöll, *Langmuir* **28** (2012) 6877. The biocompatibility of metal-organic framework coatings: An investigation on the stability of SURMOFs with regard to water and selected cell culture media
- M.P. Arpa-Sancet, C. Christophis, A. Rosenhahn, *Biointerphases* **7** (2012) 26. Microfluidic assay to quantify the adhesion of marine bacteria
- C. Kasper, H. Alborzinia, S. Can, I. Kitanovic, A. Meyer, Y Geldmacher, M. Oleszak, I. Ott, S. Wölfl, W. S. Sheldrick, *J. Inorg. Biochem.* **106** (2012) 126-133. Synthesis and cellular impact of diene-ruthenium(II) complexes: a new class of organoruthenium anticancer agents.
- Y. Geldmacher, K. Splith, I. Kitanovic, H. Alborzinia, S. Can, R. Rubbiani, Mhd. A. Nazif, P. Wefelmeier, A. Prokop I. Ott, S. Wölfl, I. Neundorf, W. S. Sheldrick, *J. Biol. Inorg. Chem.* **17** (2012) 631 - 646. Cellular impact and selectivity of half-sandwich organorhodium(III) anticancer complexes and their organoiridium(III) and trichloridorhodium(III) counterparts.
- Mhd. A. Nazif, R. Rubbiani, H. Alborzinia, I. Kitanovic, S. Wölfl, I. Ott, W. S. Sheldrick, *Dalton Trans.* **41** (2012) 5587 - 5598. Cytotoxicity and cellular impact of dinuclear organoiridium DNA intercalators and nucleases with long rigid bridging ligands.
- S. Naskar, S. Naskar, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, M. Carbella, J. Tercero, S. K. Chattopadhyay, *Polyhedron* **35** (2012) 77-86. Study of copper(II) complexes of two diacetyl monooxime thiosemicarbazones: X-ray crystal structure and magneto-structural correlation of $[\text{Cu}(\text{dmoTSC})\text{Cl}]_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$.
- A. Meyer, C. P. Bagowski, M. Kokoschka, M. Stefanopoulou, H. Alborzinia, S. Can, D. H. Vlecken, W. S. Sheldrick, S. Wölfl, I. Ott, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51** (2012) 8895 - 8890. On the biological properties of alkynyl gold(I) phosphine bioorganometallics.
- S. Datta, D. K. Seth, S. Halder, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, M. G. B. Drew, S. Bhattacharya, *RSC Advances* **2** (2012) 5254 - 5264. Mononuclear palladium and heterodinuclear palladium-ruthenium complexes of semicarbazone ligands. Synthesis, characterization and application in C – C cross-coupling reactions.
- Y. Geldmacher, M. Oleszak, W. S. Sheldrick, *Inorg. Chim. Acta* **393** (2012) 84-102. Rhodium(III) and iridium(III) complexes as anticancer agents.
- W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **638** (2012) 2401 - 2424. Polychalcogenide anions: structural diversity and ligand versatility.
- S. Bloemendal, Y. Bernhards, K. Bartho, A. Dettmann, O. Voigt, I. Teichert, S. Seiler, D. A. Wolters, S. Pöggeler, U. Kück, *Mol. Microbiol.* **84** (2012) 310–323. A homologue of the human STRIPAK complex controls sexual development in fungi.
- M. M. Cortese-Krott, A. Rodriguez-Mateos, R. Sansone, G. G. C. Kuhnle, S. Thasian-Sivarajah, T. Krenz, P. Horn, C. Krisp, D. Wolters, C. Heiß et al. *Blood* **120** (2012)

- 4229–4237. Human red blood cells at work: identification and visualization of erythrocytic eNOS activity in health and disease.
- Ö. Demirel, I. Jan, D. Wolters, J. Blanz, P. Saftig, R. Tampé, R. Abele. *J. Cell. Sci.* **125** (2012) 4230–4240. The lysosomal polypeptide transporter TAPL is stabilized by interaction with LAMP-1 and LAMP-2.
 - M. Gertz, G. T. T. Nguyen, F. Fischer, B. Suenkel, C. Schlicker, B. Fränzel, J. Tomaschewski, F. Aladini, C. Becker, D. Wolters et al. *PLoS ONE* **7** (2012) e49761. A molecular mechanism for direct sirtuin activation by resveratrol.
 - S. Gesing, D. Schindler, B. Fränzel, D. Wolters, M. Nowrousian. *Mol. Microbiol.* **84** (2012) 748–765. The histone chaperone ASF1 is essential for sexual development in the filamentous fungus *Sordaria macrospora*.
 - C. Krisp, M. J. McKay, D. A. Wolters, M. P. Molloy. *Anal. Chem.* **84** (2012) 1592–1600. Multidimensional protein identification technology-selected reaction monitoring improving detection and quantification for protein biomarker studies.
 - P. Luedike, U. B. Hendgen-Cotta, J. Sobierajski, M. Totzeck, M. Reeh, M. Dewor, H. Lue, C. Krisp, D. Wolters, M. Kelm et al. *Circulation* **125** (2012) 1880–1889. Cardioprotection through S-nitros(yl)ation of macrophage migration inhibitory factor.
 - I. M. Melzer, S. B. M. Fernández, S. Bösser, K. Lohrig, U. Lewandrowski, D. Wolters, S. Kehrloesser, M.-L. Brezniceanu, A. C. Theos, P. M. Irusta et al. *Cell Death Differ.* **19** (2012) 1435–1445. The Apaf-1-binding protein Aven is cleaved by Cathepsin D to unleash its anti-apoptotic potential.
 - D. A. Wolters, M. Stefanopoulou, P. J. Dyson, M. Groessl. *Metallomics* **4** (2012) 1185–1196. Combination of metallomics and proteomics to study the effects of the metallodrug RAPTA-T on human cancer cells.
 - M. Wotske, Y. Wu, D. A. Wolters. *Anal. Chem.* **84** (2012) 6848–6855. Liquid chromatographic analysis and mass spectrometric identification of farnesylated peptides.
 - N. Plumeré, *Nature Nanotechnology* **7**(10) (2012) 616–617. Single molecules: a protein in the spotlight.
 - M. Swoboda, J. Henig, H.-M. Cheng, D. Brugger, D. Haltrich, N. Plumeré, M. Schlierf, *ACS Nano* **6**(7) (2012) 6364–6369. Enzymatic oxygen scavenging for photostability without pH drop in single-molecule experiments.
 - N. Plumeré, J. Henig and W. H. Campbell, *Anal. Chem.* **84** (2012) 2141–2146. Enzyme-catalyzed O₂ removal system for electrochemical analysis under ambient air: application in an amperometric nitrate biosensor.
 - B. Mizaikoff, M. Laemmerhofer, J. A. C. Broekaert, J. Popp, B. Lendl, K. Leopold, F. W. Scheller, A. Yarman, S. Schumacher, N. Plumeré, A. Hennig, W. Nau, C. Kranz, J. W. Einax, *Nachrichten aus der Chemie* **60**(4) (2012) 406–420. Analytical chemistry 2010/2011.
 - N. Plumeré, A. Ruff, B. Speiser, V. Feldmann and H. A. Mayer, *J. Coll. Interf. Sci.* **368** (2012) 208–219. Stöber silica particles as basis for redox modifications: particle shape, size, polydispersity and porosity.
 - N. Plumeré, W. H. Campbell, E. R. Campbell, *U.S. Pat. Appl. Publ.* (2012) US 20120211372 A1 20120823. Systems and methods for enzymatic oxygen removal.
 - M. Pasta, A. Battistel, F. La Mantia, *Energy Environ. Sci.* **5** (2012) 9487–9491. Batteries for lithium recovery from brines.

- J. Stojadinović, D. Wiedenmann, M. Gorbar, F. La Mantia, L. Suarez, V. Zakaznova-Herzog, U.F. Vogt, B. Grobety, A. Züttel, *ECS Electrochem. Lett.* **1** (2012) F25-F28. Electrochemical characterization of porous diaphragm.
- F. La Mantia, J. Stojadinović, M. Santamaria, F. Di Quarto, *ChemPhysChem* **13** (2012) 2910-2918. Dynamic response of thin film semiconductors to ac voltage perturbations.
- Q. Van Overmeere, F. Blaffart, F. La Mantia, F. Di Quarto, J. Proost, *J. Appl. Phys.* **111** (2012) 113529. Electromechanical coupling in anodic niobium oxide: electric field-induced strain, internal stress and dielectric response.
- M. Pasta, A. Battistel, F. La Mantia, *Electrochem. Comm.* **20** (2012) 145-148. Lead-lead fluoride reference electrode.
- M. Pasta, L.B. Hu, F. La Mantia, Y. Cui, *Electrochem. Comm.* **19** (2012) 81-84. Electrodeposited gold nanoparticles on carbon nanotube-textile: anode material for glucose alkaline fuel cells.
- M. Pasta, C.D. Wessells, Y. Cui, F. La Mantia, *Nano Lett.* **12** (2012) 839-843. A desalination battery.
- M. Huang, J.B. Henry, P. Fortgang, J. Henig, N. Plumeré, A.S. Bandarenka, *RSC Adv.* **2** (2012) 10994-11006. In depth analysis of complex interfacial processes: in situ electrochemical characterisation of deposition of atomic layers of Cu, Pb and Te on Pd electrodes.
- A.S. Bandarenka, A.S. Varela, M. Karamad, F. Calle-Vallejo, L. Bech, F.J. Perez-Alonso, J. Rossmeisl, I.E.L. Stephens, I. Chorkendorff, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51** (2012) 11845-11848. The design of an active site towards optimal electrocatalysis: Overlayers, surface alloys and near-surface alloys of Cu/Pt(111).
- A.S. Bondarenko, *Anal. Chim. Acta* **743** (2012) 41-50. Analysis of large experimental datasets in electrochemical impedance spectroscopy.
- A.S. Bondarenko, I.E.L. Stephens, I. Chorkendorff, *Electrochem. Commun.* **23** (2012) 33-36. A cell for the controllable thermal treatment and electrochemical characterisation of single crystal alloy electrodes.
- B.B. Berkes, J.B. Henry, M. Huang, A.S. Bondarenko, *ChemPhysChem* **13** (2012) 3210-3217. Electrochemical Characterisation of Copper Thin Film Formation on Polycrystalline Platinum.
- A.S. Bondarenko, I.E.L. Stephens, L. Bech, I. Chorkendorff, *Electrochim. Acta* **82** (2012) 517-523. Probing Adsorption Phenomena on a Single Crystal Pt-alloy Surface under Oxygen Reduction Reaction Conditions.
- I.E.L. Stephens, A.S. Bondarenko, U. Grønbjerg, J. Rossmeisl, I. Chorkendorff, *Energy & Environ. Sci.* **5** (2012) 6744-6762. Understanding the electrocatalysis of oxygen reduction on platinum and its alloys.
- I.E.L. Stephens, A.S. Bondarenko, L. Bech, I. Chorkendorff, *ChemCatChem* **4** (2012) 341-349. Oxygen electroreduction activity and X-ray photoelectron spectroscopy of alloys of platinum and early transition metals.

Theoretische Chemie

- **Book:** J. Grotendorst, G. Sutmann, G. Gompper, and D. Marx, (Editors), Hierarchical Methods for Dynamics in Complex Molecular Systems. (Institute for Advanced Simulation and Jülich Supercomputing Centre, Forschungszentrum Jülich 2012).

- **Review Article:** J. Ribas-Arino and D. Marx, *Chem. Rev.* **112** (2012) 5412-5487. Covalent Mechanochemistry: Theoretical Concepts and Computational Tools with Applications to Molecular Nanomechanics.
- **Feature Article:** A. Witt, S. D. Ivanov, and D. Marx, *Akademie Aktuell* **41**(2012) 66-69. Dem Geheimnis einer „Supersäure“ auf der Spur
- **Feature Article:** R. Graves, G. Mathias, and D. Marx, *inSiDE (Innovatives Supercomputing in Deutschland)* **10** (2012) 40-43. “In Silico” Phosphate Transfer: From Bulk Water to Enzymes
- **Feature Article:** P. Dopieralski, P. Anjukandi, J. Ribas-Arino, and D. Marx, *inSiDE (Innovatives Supercomputing in Deutschland)* **10** (2012) 48-53. Theoretical Mechanochemistry: Stressing Molecules in the “Virtual Lab”
- C. Wittekindt and D. Marx, *J. Chem. Phys.* **137** (2012) 054710-1-8 (2012). Water confined between sheets of mackinawite FeS minerals
- M. Böckmann, N. L. Doltsinis, and D. Marx, *J. Chem. Phys.* **137** (2012) 22A505-110-10. Enhanced photoswitching of bridged azobenzene studied by nonadiabatic ab initio simulation
- M. Heyden, J. Sun, H. Forbert, G. Mathias, M. Havenith, and D. Marx, *J. Phys. Chem. Lett.* **3** (2012) 2135-2140. Understanding the Origins of Dipolar Couplings and Correlated Motion in the Vibrational Spectrum of Water (with 15 pages of Supporting Information)
- Md. E. Ali, N. N. Nair, V. Staemmler, and D. Marx, *J. Chem. Phys.* **136** (2012) 224101-1-8. Constrained spin-density dynamics of an iron-sulfur complex: Ferredoxin cofactor
- R. Graves, G. Mathias, and D. Marx, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012) 6995-7000. Mechanistic Insights into the Hydrolysis of a Nucleoside Triphosphate Model in Neutral and Acidic Solution (with 18 pages of Supporting Information)
- J. Lessing, S. Roy, M. Reppert, M. Baer, D. Marx, T. L. C. Jansen, J. Knoester, and A. Tokmanoff, *J. Am. Chem. Soc. (Communication)* **134** (2012) 5032-5035. Identifying Residual Structure in Intrinsically Disordered Systems: A 2D IR Spectroscopic Study of the GVGXPGVG Peptide (with 10 pages of Supporting Information)
- S. Braun, M. Böckmann, and D. Marx, *ChemPhysChem (Communication)* **13** (2012) 1140-1443. Unfolding a Photoswitchable Azo-Foldamer Reveals a Non-Covalent Reaction Mechanism
- G. Mathias, S. D. Ivanov, A. Witt, M. D. Baer, and D. Marx, *J. Chem. Theory Comput.* **8** (2012) 224-234. Infrared Spectroscopy of Fluxional Molecules from (ab Initio) Molecular Dynamics: Resolving Large-Amplitude Motion, Multiple Conformations, and Permutational Symmetries
- M. Farnesi Camellone and D. Marx, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 937-944. Solvation of Au^+ versus Au^0 in aqueous solution: electronic structure governs solvation shell patterns
- N. Artrith, J. Behler, *Phys. Rev. B* **85** (2012) 045439-1-13. High-dimensional neural network potentials for metal surfaces: A prototype study for copper.
- T. Morawietz, V. Sharma, J. Behler, *J. Chem. Phys.* **136** (2012) 064103-1-11. A neural network potential-energy surface for the water dimer based on environment-dependent atomic energies and charges.

- H. Eshet, R.Z. Khaliullin, T.D. Kühne, J. Behler, M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 115701–1-4. Microscopic origins of the anomalous melting behaviour of sodium under high pressure.
- G.C. Sosso, G. Miceli, S. Caravati, J. Behler, M. Bernasconi, *Phys. Rev. B* **85** (2012) 174103–1-13. Neural network interatomic potential for the phase change material GeTe.
- G.C. Sosso, D. Donadio, S. Caravati, J. Behler, M. Bernasconi, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 104301–1-5. Thermal transport in phase change materials from atomistic simulations.
- Jovan Jose K.V., N. Artrith, J. Behler, *J. Chem. Phys.* **136** (2012) 194111–1-15. Construction of high-dimensional neural network potentials using environment-dependent atom pairs.
- G.C. Sosso, J. Behler, M. Bernasconi, *Phys. Stat. Sol. B* **249** (2012) 1880–1885. Breakdown of Stokes-Einstein relation in the supercooled liquid state of phase change materials.
- N. O. C. Winter, C. Hättig, *Chem. Phys.* **401** (2012) 217-227. Quartic scaling analytic gradients of scaled opposite-spin CC2.
- C. Hättig, W. Klopper, A. Köhn, D. P. Tew, *Chem. Rev.* **112** (2012) 4-74. Explicitly Correlated Electrons in Molecules.
- D. H. Fries, C. Hättig, K. Ruud, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 1175-1184. Calculation of two-photon absorption strengths with the approximate coupled cluster singles and doubles model CC2 using the resolution-of-identity approximation.
- J. Koßmann, G. Roßmüller, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **136** (2012) 034706. Prediction of Vibrational Frequencies of Possible Intermediates and Side Products of the Methanol Synthesis on ZnO(000-1) by Ab Initio Calculations.
- C. Hättig, G. Schmitz, J. Koßmann, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 6549-6555. Auxiliary basis sets for density-fitted correlated wavefunction calculations: Weighted core-valence and ECP basis sets for post-d elements.
- D. H. Fries, N. O. C. Winter, P. Balzerowski, R. Schwan, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* (2012) 174106. Large scale polarizability calculations using the approximate coupled cluster model CC2 and MP2 combined with the resolution-of-the-identity approximation.
- C. Hättig, D. Tew, B. Helmich, *J. Chem. Phys.* **136** (2012) 204105. Local explicitly correlated second- and third-order Møller-Plesset perturbation theory with pair natural orbitals.
- T. Schwabe, K. Sneskov, J. M. H. Olsen, J. Kongsted, O. Christiansen, C. Hättig, *J. Chem. Theory Comput.* **8** (2012) 3274-3273. PERI-CC2: A Polarizable Embedded RI-CC2 Method.
- D. Stodt, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **137** (2012) 116705. Embedded cluster density-functional and second-order Møller-Plesset perturbation theory study on the adsorption of N₂ on the rutile (110) surface.
- J. Koßmann, C. Hättig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 16392-16399. Investigation of Interstitial Hydrogen and related Defects in ZnO.
- W. Kutzelnigg, *J. Chem. Phys.* **401** (2012) 119-124. Separation of strong (bond-breaking) from weak (dynamical) correlation.
- W. Kutzelnigg, *J. Chem. Phys.* **395** (2012) 16-34. Solved and unsolved problems in relativistic quantum chemistry.

- F. Uhl, V. Staemmler, *J. Phys. Condens. Matter*, **24** (2012) 305501. Ab initio calculation of correlation effects for the O1s core electron binding energy in MgO.
- R. Jennerjahn, R. Jackstell, I. Piras, R. Franke, H. Jiao, M. Bauer, M. Beller, *ChemSusChem*, **5**, (2012), 734-739. Benign Catalysis with Iron: Unique Selectivity in Catalytic Isomerization Reactions of Olefins
- C. Kubis, D. Selent, M. Sawall, R. Ludwig, K. Neymeyr, W. Baumann, R. Franke, A. Börner, *Chem. Eur. J.*, **18**, (2012), 8780-8794. Exploring Between the Extremes: Conversion-Dependent Kinetics of Phosphite-Modified Hydroformylation
- R. Franke, D. Selent, A. Börner, *Chem. Rev.*, **112**, (2012), 5675-5732. Applied Hydroformylation
- D. Hess, B. Hannebauer, M. König, M. Reckers, S. Buchholz, R. Franke, *Z. Naturforsch. B*, **67**, (2012), 1061-1069. Operando infrared spectroscopic and quantum-chemical studies on iridium-catalyzed hydroformylation
- R. Franke, B. Hannebauer, S. Jung, *Fluid Phase Equilib.*, **340**, (2013), 11-14 [published online 3 December 2012]. Accurate pre-calculation of limiting activity coefficients by COSMO-RS with molecular-class based parameterization

Technische Chemie

- H.J. Schulte, B. Graf, W. Xia, M. Muhler, *ChemCatChem* **4** (2012) 350-355. Nitrogen- and Oxygen-Functionalized Multiwalled Carbon Nanotubes Used as Support in Iron-Catalyzed, High-Temperature Fischer-Tropsch Synthesis
- E. Ventosa, W. Xia, S. Klink, F. La Mantia, M. Muhler, *Electrochim. Acta* **65** (2012) 22-29. Influence of Surface Functional Groups on Lithium Ion Intercalation of Carbon Cloth
- M. Xu, H. Noei, M. Buchholz, M. Muhler, Ch. Wöll, Y. Wang, *Catal. Today* **182** (2012) 12-15. Dissociation of Formic Acid on Anatase TiO₂ (101) Probed by Vibrational Spectroscopy
- L. Katta, B.M. Reddy, M. Muhler, W. Grünert, *Catal. Sci. Technol.* **2** (2012) 745-753. Interfacial Interaction Driven CO Oxidation: Nanostructured Ce_{1-x}La_xO_{2-δ}/TiO₂ Solid Solutions
- S. Klink, E. Ventosa, W. Xia, F. La Mantia, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **15** (2012) 10-13. Tailoring of CNT Surface Oxygen Groups by Gas-Phase Oxidation and its Implications for Lithium Ion Batteries
- T.C. Nagaiah, A. Bordoloi, M.D. Sánchez, M. Muhler, W. Schuhmann, *ChemSusChem* **5** (2012) 637-641. Mesoporous Nitrogen-Rich Carbon Materials as Catalysts for the Oxygen Reduction Reaction in Alkaline Solution
- J. Masa, A. Bordoloi, M. Muhler, W. Schuhmann, W. Xia, *ChemSusChem* **5** (2012) 523-525. Enhanced Electrocatalytic Stability of Platinum Nanoparticles Supported on a Nitrogen-Doped Composite of Carbon Nanotubes and Mesoporous Titania under Oxygen Reduction Conditions
- W. Jia, C. Jin, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, L. Stoica, *Chem. – Eur. J.* **18** (2012) 2783-2786. Glucose Oxidase/Horseradish Peroxidase Co-immobilized at a CNT-Modified Graphite Electrode: Towards Potentially Implantable Biocathodes
- Boz, S. Kaluza, M.S. Boroglu, M. Muhler, *Mat. Res. Bull.* **47** (2012) 1185-1190. Synthesis of High Surface Area ZnO Powder by Continuous Precipitation

- M. Xu, H. Noei, K. Fink, M. Muhler, Y. Wang, Ch. Wöll, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51** (2012) 4731-4734. The Surface Science Approach for Understanding Reactions on Oxide Powders: The Importance of IR spectroscopy
- C. Jin, W. Xia, P. Chen, M. Muhler, *Catal. Today* **186** (2012) 128-133. On the Role of the Residual Iron Growth Catalyst in the Gasification of Multi-walled Carbon Nanotubes with Carbon Dioxide
- H. Noei, A. Birkner, K. Merz, M. Muhler, Y. Wang, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 11181-11188. Probing the Mechanism of Low-Temperature CO Oxidation on Au/ZnO Catalysts by Vibrational Spectroscopy
- Z. Sun, J. Masa, Z. Liu, W. Schuhmann, M. Muhler, *Chem. Eur. J.* **18** (2012) 6972-6978. Highly Concentrated Aqueous Dispersions of Graphene Exfoliated by Sodium Taurodeoxycholate: Dispersion Behavior and Potential Application as a Catalyst Support for the Oxygen-Reduction Reaction
- V.G. Ramu, A. Bordoloi, T.C. Nagaiah, W. Schuhmann, M. Muhler, C. Cabrele, *Appl. Catal., A* **431-432** (2012) 88-94. Copper Nanoparticles Stabilized on Nitrogen-Doped Carbon Nanotubes as Efficient and Recyclable Catalysts for Alkyne/Aldehyde/Cyclic Amine A³-Type Coupling Reactions
- H. Noei, S. Amirjalayer, M. Müller, X. Zhang, R. Schmid, M. Muhler, R.A. Fischer, Y. Wang, *ChemCatChem* **4** (2012) 755-759. Low-Temperature CO Oxidation over Cu-Based Metal–Organic Frameworks Monitored by using FTIR Spectroscopy
- G. Shi, T. Franzke, M.D. Sánchez, W. Xia, F. Weis, M. Seipenbusch, G. Kasper, M. Muhler, *ChemCatChem* **4** (2012) 760-765. Thin-film β -MoO₃ Supported on α -Fe₂O₃ as a Shell-Core Catalyst for the Selective Oxidation of Methanol to Formaldehyde
- M. Pang, C. Liu, W. Xia, M. Muhler, C. Liang, *Green Chem.* **14** (2012) 1272-1276. Activated Carbon Supported Molybdenum Carbides as Cheap and Highly Efficient Catalyst in the Selective Hydrogenation of Naphthalene to Tetralin
- M.A. Sliem, S. Turner, D. Heeskens, S.B. Kalidindi, G. Van Tendeloo, M. Muhler, R.A. Fischer, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 8170-8178. Preparation, Microstructure Characterization and Catalytic Performance of Cu/ZnO and ZnO/Cu Composite Nanoparticles for Liquid Phase Methanol Synthesis
- S. Kundu, T.C. Nagaiah, X. Chen, W. Xia, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *Carbon* **50** (2012) 4534-4542. Synthesis of an Improved Hierarchical Carbon-Fiber Composite as a Catalyst Support for Platinum and its Application in Electrocatalysis
- R.W. Gosselink, R. van den Berg, W. Xia, M. Muhler, K.P. de Jong, J.H. Bitter, *Carbon* **50** (2012) 4424-4431. Gas Phase Oxidation as a Tool to Introduce Oxygen Containing Groups on Metal-Loaded Carbon Nanofibers
- B. Mei, A. Becerikli, A. Pougin, D. Heeskens, I. Sinev, W. Grünert, M. Muhler, J. Strunk, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 14318-14327. Tuning the Acid/Base and Structural Properties of Titanate-Loaded Mesoporous Silica by Grafting of Zinc Oxide
- Ramakrishnan, S. Neubert, B. Mei, J. Strunk, L. Wang, M. Bledowski, M. Muhler, R. Beranek, *Chem. Commun.* **48** (2012) 8556-8558. Enhanced Performance of Surface-modified TiO₂ Photocatalysts Prepared via a Visible-Light Photosynthetic Route
- C. Li, A. Zhao, W. Xia, C. Liang, M. Muhler, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 20930-20936. Quantitative Studies on the Oxygen and Nitrogen Functionalization of Carbon Nanotubes Performed in the Gas Phase

- Z. Sun, J. Masa, W. Xia, D. König, A. Ludwig, Z.-A. Li, M. Farle, W. Schuhmann, M. Muhler, *ACS Catal.* **2** (2012) 1647-1653. Rapid and Surfactant-Free Synthesis of Bimetallic Pt–Cu Nanoparticles Simply via Ultrasound-Assisted Redox Replacement
- G.W. Busser, B. Mei, M. Muhler, *ChemSusChem* **5** (2012) 2200-2006. Optimizing the Deposition of Hydrogen Evolution Sites on Suspended Semiconductor Particles using On-Line Photocatalytic Reforming of Aqueous Methanol Solutions
- M. Peter, B.M. Fichtl, H. Ruland, S. Kaluza, M. Muhler, O. Hinrichsen, *Chem. Eng. J.* **203** (2012) 480-491. Detailed Kinetic Modeling of Methanol Synthesis over a Ternary Copper Catalyst
- M. Sánchez, P. Chen, T. Reinecke, M. Muhler, W. Xia, *ChemCatChem* **4** (2012) 1997-2004. The role of oxygen- and nitrogen containing surface groups on the sintering of iron nanoparticles on carbon nanotubes in different atmospheres
- P. G. W. A. Kompio, A. Brückner, F. Hipler, G. Auer, E. Löffler W. Grünert, *J. Catal.* **286** (2012) 237-247. A new view on the relations between tungsten and vanadium in V_2O_5 - WO_3 / TiO_2 catalysts for the selective reduction of NO with NH_3 .
- W. Grünert, Chapter 13 in “*Characterisation of Solid Materials: From Structure to Surface Reactivity*” (M. Che, J. Vedrine, Eds), Wiley-VCH, Weinheim 2012, Vol. 1, p. 537-583. Auger Electron, X-ray and UV Photoelectron Spectroscopies.
- L. Katta, B. M. Reddy, M. Muhler, W. Grünert, *Catal. Sci. Technol.* **2** (2012) 745-753. Interfacial interaction driven CO oxidation: nanostructured $Ce_{1-x}La_xO_{2-x}$ / TiO_2 solid solutions
- G. C. Mondragón Rodríguez, K. Kelm, S. Heikens, W. Grünert, B. Saruhan, *Catal. Today* **184** (2012) 184-191. Pd-integrated perovskites for TWC application: Synthesis, microstructure and N_2O selectivity.
- B. Mei, A. Becerikli, A. Pougin, D. Heeskens, I. Sinev, W. Grünert, M. Muhler, J. Strunk, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 14318-14327. Tuning the acid/base and structural properties of titanate-loaded mesoporous silica by grafting of zinc oxide.
- M. Reichinger, W. N. Schmidt, V. V. Narkhede, W. P. Zhang, H. Gies, W. Grünert, *Microporous Mesopor. Mater.* **164** (2012) 21-31. Ordered Mesoporous Materials with MFI Structured Microporous Walls – Synthesis and Proof of Wall Microporosity.
- L. I. Rodionova, A. V. Smirnov, N. E. Borisova, V. N. Khrustalev, A. A. Moiseeva, W. Grünert, *Inorg. Chim. Acta* **392** (2012) 221-228. Binuclear cobalt complex with Schiff base ligands: synthesis, characterization and catalytic properties in partial oxidation of cyclohexane.
- V. I. Isaeva, O. P. Tkachenko, E. V. Afonina, L. M. Kozlova, G. I. Kapustin, W. Grünert, S. E. Solov’eva, I. S. Antipin, L. M. Kustov, *Microporous Mesopor. Mater.* **166** (2012) 167-175. 2-Butyne-1,4-diol hydrogenation over palladium supported on Zn^{2+} -based - MOF and host-guest MOF/calix[4]arene materials.
- T. Drescher, F. Niefind, W. Bensch, W. Grünert, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012) 18896-18899. Sulfide Catalysis without coordinatively unsaturated sites: Hydrogenation, cis-trans isomerisation and H_2D_2 scrambling over MoS_2 and WS_2 .
- W. Grünert, *Angewandte Chemie Int. Ed.* **51** (2012) 5289 (*Angew. Chem.* 124 (2012) 5383). “Heterogeneous Catalysis – Fundamentals and Application” by Julian R. H. Ross, Elsevier B. V. 2012 (Buchrezension)
- M. Sharifi, J. Schneider, M. Wark, *Microporous Mesoporous Mater.* **151** (2012), 506-510. Investigation on the optimal oxidation agent for a maximum yield of sulfonic acid groups in MCM-41

- R. Marschall, C. Klaysom, A. Mukherji, M. Wark, G.Q. (Max) Lu, L.Z. Wang, *Int. J. Hydrogen Energy* **39** (2012), 4012-4017. Composite proton conducting polymer membranes for clean hydrogen production with solar light in a simple photoelectrochemical compartment cell
- H. Graaf, F. Lüttich, C. Dunkel, M. Wark, T. Oekermann, *J. Phys. Chem. C*, **116** (2012), 5610-5613. Influence of Coumarin 343 Monomer Co-Deposition on the Structure and Electronic Properties of Electrodeposited ZnO
- M. Sharifi, M. Wark, D. Freude, J. Haase, *Microporous Mesoporous Mater.* **156** (2012), 80-89, DOI: 10.1016/j.micromeso.2012.02.019. Highly proton conducting sulfonic acid functionalized mesoporous materials studied by impedance spectroscopy, MAS NMR spectroscopy and MAS PFG NMR diffusometry
- M. Sharifi, D. Wallacher, M. Wark, *Beilstein J. Nanotechnol.* **3** (2012), 428-437. Distribution of functional groups in periodic mesoporous organosilica materials studied by small angle neutron scattering with in-situ adsorption of nitrogen
- O. Merka, D.W. Bahnemann, M. Wark, *ChemCatChem* **4** (2012) 1819-1827, DOI: 10.1002/cctc.201200148. Improved Photocatalytic Hydrogen Production by Structure Optimized Non-Stoichiometric $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$
- C. Dunkel, F. Lüttich, H. Graaf, T. Oekermann, M. Wark, *Electrochim. Acta* **80** (2012) 60-67, DOI: 10.1016/j.electacta.2012.06.113. Investigation of the pulsed electrochemical deposition of ZnO
- B. Seelandt, M. Wark, *Microporous Mesoporous Mater.* **164** (2012) 67-70, DOI: 10.1016/j.micromeso.2012.06.015. Electrodeposited Prussian Blue in mesoporous TiO_2 as electrochromic hybrid material
- P. Tölle, C. Köhler, R. Marschall, M. Sharifi, M. Wark, T. Frauenheim, *Chem. Soc. Rev.* **41** (2012), 5143-5159, DOI: 10.1039/C2CS15322J. Proton Transport in Functionalised Additives for PEM Fuel Cells: Contributions from Atomistic Simulation
- H. Noei, A. Birkner, K. Merz, M. Muhler, Y. Wang, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 11181–11188. Probing the mechanism of low-temperature CO oxidation on Au/ZnO catalysts by vibrational spectroscopy
- M. Xu, H. Noei, K. Kink, M. Muhler, Y. Wang, Ch. Wöll, *Angew. Chem.* **124** (2012) 4810-4813. Anwendung des oberflächenwissenschaftlichen Ansatzes auf Reaktionen an Oxidpulvern: die Bedeutung der IR-Spektroskopie
- M. Xu, H. Noei, K. Kink, M. Muhler, Y. Wang, Ch. Wöll, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51** (2012) 4731-4734. The surface science approach for understanding reactions on oxide powders: The importance of IR spectroscopy
- H. Noei, S. Amirjalayer, M. Muller, X. Zhang, R. Schmid, M. Muhler, R. Fischer, Y. Wang, *ChemCatChem.* **4** (2012) 755-759. Low-temperature CO oxidation over Cu-based metal-organic frameworks monitored by using FTIR spectroscopy
- M. Xu, H. Noei, M. Buchholz, M. Muhler, Ch. Wöll, Y. Wang, *Catal. Today* **182** (2012) 12-15. Dissociation of formic acid on anatase $\text{TiO}_2(101)$ probed by vibrational spectroscopy
- M. I. Muglali, J. X. Liu, A. Baschir, D. Borissov, M. Xu, Y. Wang, Ch. Wöll, M. Rohwerder, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 4703–4712. On the complexation kinetics for metallization of organic layers: palladium onto a pyridine-terminated araliphatic thiol film

- P. St. Petkov, G. N. Vayssilov, J. Liu, O. Shekhah, Y. Wang, C. Wöll, T. Heine, *ChemPhysChem*. **14** (2012) 2025–2029. Defects in MOFs: A thorough characterization
- A. Devi, S. Cwik, K. Xu, A.P. Milanov, H. Noei, Y. Wang, D. Barreca, J. Meijer, D. Rogalla, D. Kahn, R. Cross, H. Parala, S. Paul, *Thin Solid Films* **520** (2012) 4512–4517. Rare-earth substituted HfO₂ thin films grown by metalorganic chemical vapor deposition
- B. Mei, A. Becerikli, A. Pougin, D. Heeskens, I. Sinev, W. Grünert, M. Muhler, J. Strunk, *J. Phys. Chem. C* **116** (2012) 14318–14327. Tuning the Acid/Base and Structural Properties of Titanate-Loaded Mesoporous Silica by Grafting of Zinc Oxide.
- A. Ramakrishnan, S. Neubert, B. Mei, J. Strunk, L. Wang, M. Bledowski, M. Muhler, R. Beranek, *Chem. Commun.* **48** (2012) 8556 – 8558. Enhanced Performance of Surface-modified TiO₂ Photocatalysts Prepared via a Visible-Light Photosynthetic Route.
- W.C. Vining, J. Strunk, A.T. Bell, *J. Catal.* **285** (2012) 160–167. Investigation of the structure and activity of VO_x/CeO₂/SiO₂ catalysts for methanol oxidation to formaldehyde

Biochemie 1

- S. Pachernegg, N. Strutz-Seeböhm, M. Hollmann. *Trends in Neuroscience* **35**(4) (2012) 240–249. GluN3 subunit-containing NMDA receptors: Not just one-trick ponies.
- G. Seeböhm, S. Neumann, C. Theiss, T. Novkovic, E.V. Hill, J.M. Tavaré, F. Lang, M. Hollmann, D. Manahan-Vaughan, N. Strutz-Seeböhm. *PLoS One* **7**(3) (2012) e33889. Identification of a novel signaling pathway and its relevance for GluA1 recycling.
- C. Herold, I. Joshi, O. Chehadi, M. Hollmann, O. Güntürkün. *PLoS One* **7**(5) (2012) e36484. Plasticity in D1-like receptor expression is associated with different components of cognitive processes.
- Y.Y. Mor, S. Kuttner, M. Levy, M. Mor, M. Hollmann, Y. Grossman. *Frontiers in Cellular Neuroscience* **6**(article 37) (2012) 1–9. Pressure-selective modulation of NMDA receptor subtypes may reflect 3D structural differences.
- M. Hollmann. In: *Die Bibliothek als Erfolgsfaktor: Die Universitätsbibliothek Bochum nach 50 Jahren; 1962–2012*. Ruhr-Universität Bochum (2012) pp. 5–6. Grußwort des Vorsitzenden des Hochschulbibliotheks-beirats zum 50-jährigen Jubiläum der Universitätsbibliothek Bochum.
- T. Huelsken, D. Tapken, T. Dahlmann, H. Wägele, Cynthia Riginos, M. Hollmann. *Organisms, Diversity and Evolution* **12** (2012) 349–375. Systematics and phylogenetic species delimitation within *Polinices s.l.* (Caenogastropoda: Naticidae) based on molecular data and shell morphology.
- F.G. Boess, J. de Vry, C. Erb, T. Flessner, M. Hendrix, J. Luithle, C. Methfessel, K. Schnizler, F.J. van der Staay, M. van Kampen, W.B. Wiese, G. König G. *Psychopharmacology (Berlin)* [e-published ahead of print 16.12.2012]. Pharmacological and behavioral profile of N-[(3R)-1-azabicyclo[2.2.2]oct-3-yl]-6-chinolincarboxamide (EVP-5141), a novel $\alpha 7$ nicotinic acetylcholine receptor agonist/serotonin 5-HT(3) receptor antagonist.

- L.N. Vandenberg, E.D. Morrie, G. Seeböhm, J.M. Lemire, M. Levin. *Mechanisms of Development* [e-published ahead of print, 07.11.2012] Rab GTPases are required for early orientation of the left-right axis in *Xenopus*.
- Y. Füll, G. Seeböhm, H. Lerche, S. Maljevic. *Pflügers Archiv* [e-published ahead of print, 28.12.2012]. A conserved threonine in the S1-S2 loop of K(V)7.2 and K(V)7.3 channels regulates voltage-dependent activation.
- E. Bogatikov, C. Munoz, T. Pakladok, I. Alesutan, M. Shojaiefard, G. Seeböhm, M. Föller, M. Palmada, C. Böhmer, S. Bröer, F. Lang. *Cellular Physiology and Biochemistry* **30**(6) (2012) 1538-1546. Up-regulation of amino acid transporter SLC6A19 activity and surface protein abundance by PKB/Akt and PIKfyve.
- S. Zumhagen, B. Stallmeyer, C. Friedrich, L. Eckardt, G. Seeböhm, E. Schulze-Bahr. *Herzschrittmachertherapie + Elektrophysiologie* **23**(3) (2012) 211-219. Inherited long QT syndrome: clinical manifestation, genetic diagnostics, and therapy.
- C. Munoz, A. Saxena, T. Pakladok, E. Bogatikov, J. Wilmes, G. Seeböhm, M. Föller, F. Lang. *PLoS One* **7**(8) (2012) e43353. Stimulation of HERG channel activity by β -catenin.
- E. Wrobel, D. Tapken, G. Seeböhm. *Frontiers in Pharmacology* **3** (2012) article142. The KCNE Tango - How KCNE1 Interacts with Kv7.1.
- M. Föller, M. Jaumann, J. Dettling, A. Saxena, T. Pakladok, C. Munoz, P. Ruth, M. Sopjani, G. Seeböhm, L. Rüttiger, M. Knipper, F. Lang. *FASEB Journal* **26**(10) (2012) 4243-4253. AMP-activated protein kinase in BK-channel regulation and protection against hearing loss following acoustic overstimulation.
- U. Henrion, S. Zumhagen, K. Steinke, N. Strutz-Seeböhm, B. Stallmeyer, F. Lang, E. Schulze-Bahr, G. Seeböhm. *Cellular Physiology and Biochemistry* **29**(5-6) (2012) 809-818. Overlapping cardiac phenotype associated with a familial mutation in the voltage sensor of the KCNQ1 channel.
- J. Wilmes, R. Haddad-Tóvolli, I. Alesutan, C. Munoz, M. Sopjani, L. Pelzl, E. Bogatikov, G. Fedele, C. Faggio, G. Seeböhm, M. Föller, F. Lang. *Molecular Membrane Biology* **29**(3-4) (2012) 87-94. Regulation of KCNQ1/KCNE1 by β -catenin.

Biochemie 2

- Y. Imielski, J.C. Schwamborn, P. Lüningschrör, P. Heimann, M. Holzberg, H. Werner, O. Leske, A.W. Püschel, S. Memet, R. Heumann, A. Israel, C. Kaltschmidt, B. Kaltschmidt. *PLoS ONE* **7** (2012): e30838. Regrowing the adult brain: NF- κ B controls functional circuit formation and tissue homeostasis in the dentate gyrus.
- I. Bendix, C. Schulze, C. von Haefen, A. Gellhaus, S. Endesfelder, R. Heumann, U. Felderhoff-Mueser, M. Sifringer. *Int. J. Mol. Sci.* **13** (2012) 12939-12951. Erythropoietin modulates autophagy signaling in the developing rat brain in an in vivo model of oxygen-toxicity.
- G. Gasser, A. Pinto, S. Neumann, A. Sosniak, M. Seitz, K. Merz, R. Heumann, N. Metzler-Nolte. *Dalton Transaction* **41** (2012) 2304-2313. Synthesis, Characterisation and Bioimaging of a Fluorescent Rhenium-Containing PNA Bioconjugate.
- S. Lipinski, N. Grabe, G. Jacobs, S. Billmann-Born, A. Till, R. Häsler, K. Aden, M. Paulsen, A. Arlt, L. Kraemer, N. Hagemann, K. S. Erdmann, S. Schreiber, P. Rosenstiel. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. **109** (2012) 21426-31. RNAi screening

identifies mediators of NOD2 signaling: implications for spatial specificity of MDP recognition.

- N. Hagemann, N. Ackermann, J. Christmann, S. Brier, F. Yu, K. S. Erdmann, *Oncogene* (2012) doi: 10.1038/onc.2012.485. The serologically defined colon cancer antigen-3 interacts with the protein tyrosine phosphatase PTPN13 and is involved in the regulation of cytokinesis.
- D. Kunze, K. Erdmann, M. Froehner, M. P. Wirth, S. Fuessel, *Anticancer Res.* **32** (2012) 4313-4318. siRNA-mediated inhibition of antiapoptotic genes enhances chemotherapy efficacy in bladder cancer cells.
- M. Karus, S. Samtleben, C. Busse, T. Tsai, I. D. Dietzel, A. Faissner, S. Wiese, *Neural Development* **7**:20 (2012). Normal sulphation levels regulate spinal cord neural precursor cell proliferation and differentiation (<http://www.neuraldevelopment.com/content/7/1/20>)
- I. D. Dietzel, S. Mohanasundaram, V. Niederkinkhaus, G. Hoffmann, J. W. Meyer, C. Reiners, C. Blasl, K. Bohr, in: *Thyroid Hormone*, Ed.: Neeraj Kumar Agrawal, InTech (2012) Chapter 4, pp 85-122. Thyroid Hormone Effects on Sensory Perception, Mental Speed, Neuronal Excitability and Ion Channel Regulation (<http://dx.doi.org/10.5772/48310>)
- P. Happel, D. Thatenhorst and I. D. Dietzel, *Sensors* **12** (2012) 14983-15008, Scanning Ion Conductance Microscopy for studying biological samples (<http://www.mdpi.com/1424-8220/12/11/14983>)
- M.W. Schneider, H.J. Hauswald, R. Stoll, M. Mastalerz, *Chem. Commun.* **48** (2012) 9861-9863. A shape-persistent exo-functionalized [4 + 6] imine cage with a very high surface area.
- H. B. Albada, F. Wieberneit, I. Dijkgraaf, J.H. Harvey, J.L. Whistler, R. Stoll, N. Metzler-Nolte, R.H. Fish, *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012) 10321-10324. The Chemoselective Reactions of Tyrosine-Containing G-Protein-Coupled Receptor Peptides with [Cp*Rh(H₂O)₃](OTf)₂, Including 2D NMR Structures and the Biological Consequences
- J. Schmidt, A. Riechers, R. Stoll, T. Amann, F. Fink, T. Spruss, W. Gronwald, B. König, C. Hellerbrand, A.K. Bosserhoff, *PloS One* **7** (2012) e37941. Targeting melanoma metastasis and immunosuppression with a new mode of melanoma inhibitory activity (MIA) protein inhibition
- S. Kuhn, N.E. Schlörer, H. Kohlshorn, R. Stoll, *J. Cheminformatics* **4** (Suppl 1) (2012) P52. From chemical shift data through prediction to assignment and NMR LIMS – multiple functionalities of nmrshiftdb2
- M.W. Schneider, I.M. Oppel, H. Ott, L.G. Lechner, H.J. Hauswald, R. Stoll, M. Mastalerz, *Chemistry* **18** (2012) Periphery-substituted [4 + 6] salicylbisimine cage compounds with exceptionally high surface areas: influence of the molecular structure on nitrogen sorption properties
- M. Mastalerz, H.J. Hauswald, R. Stoll, *Chem. Commun.* **48** (2012) 130-132. Metal-assisted salphen organic frameworks (MaSOFs) with high surface areas and narrow pore-size distribution
- A. B. Ziegler, F. Brüsselbach, B. T. Hovemann, *J. Comp. Neurol.*, Advance Online Publication Nov 1, 2012, doi: 10.1002/cne.23247. Activity and co-expression of *Drosophila* Black with Ebony in fly optic lobes reveals putative cooperative tasks in vision that evade ERG detection

- M. Efetova, L. Petereit, K. Rosiewicz, G. Overend, F. Haußig, B. T. Hovemann, P. Cabrero, J. A. T. Dow, M. Schwärzel, *J. Cell. Sci.*, Advance Online Publication Dec 21, 2012, doi:10.1242/jcs.114140. Separate roles of PKA and EPAC in renal function unraveled by optogenetic control of cAMP levels in vivo.
- I. Peruga, S. Hartwig, D. Merkler, J. Thöne, B. Hovemann, R. Gold, G. Juckel, R.A. Linker, *Behav. Brain. Res.*, **229** (2012) 325-332. Endogenous ciliary neurotrophic factor modulates anxiety and depressive-like behavior

Didaktik der Chemie

- H. Steff, K. Sommer, S. Venke, *Unterricht Chemie* **23** (2012) 132, S.34-37. Modellexperimente und Bauchemie.
- H. Steff, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **23** (2012) 132, S.26-33. Roheisen aus der Dose – Schüler modellieren den Hochofenprozess.
- H. Steff, K. Kluthke, J. Pietrzak, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **23** (2012) 132, S.23-25. Gewinnung von Zink im Modellexperiment.
- K. Sommer, P. Pfeifer, *Unterricht Chemie* **23** (2012) 132, S.10-16. Lebensmittel und Modellexperimente.
- K. Sommer, M. Klein, H. Steff, P. Pfeifer, *Unterricht Chemie* **23** (2012) 132, S.2-9. Modellexperimente – Zwischen Anschauungselement und Erkenntnisgewinnung.
- K. Sommer, A. Kakoschke, S. Schindler, M. Buchwald, A. Russek, A. Schäfer, H. Steff, U. Krupp, *Chemkon* **19** (2012) 3, S.131-136. „Wie ein Forscher sein“ – das didaktische Konzept für eine Bildungsinitiative in einem Forschungsunternehmen und dessen Umsetzung.
- L. Bentlage, H. Kleinhorst, K. Sommer, *Praxis der Naturwissenschaften – Chemie in der Schule* **61** (2012) 6, S.8-12. Kontaktlinsenreinigungssysteme.
- R. Wiczorek, K. Sommer, *Praxis der Naturwissenschaften – Chemie in der Schule* **61** (2012) 4, S.16-22. Antioxidantien – Die Opferanoden der Natur!?
- S. Herkommer, H. Kleinhorst, K. Sommer, *Praxis der Naturwissenschaften – Chemie in der Schule* **61** (2012) 1, S.17-24. „Smarte Smarties“ – Eine farbige Forschungsreise.
- K. Sommer, A. Russek, A. Kakoschke, P. Pfeifer, *Unterricht Chemie* **23** (2012) 130/131, S.66-69. Stärke – echt stark.
- P. Pfeifer, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **23** (2012) 128, S.45-48. Stoffperspektiven in der Chemie – Übereinstimmungen und Diskussionsbedarf.

Promotionen 2012

Thomas Drescher

Katalytische und Oberflächencharakterisierung von Übergangsmetallchalcogenid
Prof. Dr. W. Grünert
13.01.2012

Sven Dittmann

Generierung patientenspezifischer iPS-Zellen und daraus differenzierter Kardiomyozyten zur Charakterisierung von Arrhythmien
Prof. Dr. Lutz Pott
13.01.2012

Nina Olivia Caroline Winter

Effiziente Implementierung von SOS-CC2 für elektronisch angeregte Zustände großer Moleküle
Prof. Dr. C. Hättig
27.01.2012

Malte Hellwig

Vapor Phase Approaches to Nanostructured Thin Films of Transparent Metal Oxides: From Precursor Development to Application
Prof. Dr. A. Devi
22.02.2012

Sabrina Mindthoff

Funktionelle Charakterisierung der peroxisomalen Proteine Pex11p und Vps34p in der Hefe *Saccharomyces cerevisiae*
Prof. Dr. R. Erdmann
02.03.2012

Katja Steinke

Modulation kardialer Ionenkanäle durch Coxsackievirus B3
Prof. Dr. Guiscard Seeböhm
02.03.2012

Hendrik Johannes Schulte

Kinetische Untersuchungen zur Herstellung von kurzkettigen α -Olefinen mit ungeträgerten und CNT-geträgerten Fischer-Tropsch-Eisenkatalysatoren
Prof. Dr. M. Muhler
12.03.2012

Michael Teka Woldemedhin

Evaluation of the surface reactivity of beta-Titanium
Prof. Dr. A. W. Hassel
13.03.2012

Janine R. Neumann

Effekte des Dermcidin-Peptids Y-P30 auf zelluläre und molekulare Vorgänge während der Entwicklung des zentralen Nervensystems der Ratte

Prof. Dr. P. Wahle

16.03.2012

Fabian Hertel

Entwicklung und Anwendung genetisch kodierter molekularer \$toolkits\$ zur Untersuchung der Regulation von Ionenkanälen durch Phosphoinositide

Prof. Dr. L. Pott

30.03.2012

Sebastian Preilowski

Auswirkungen von cTnI-R145G in adulten Rattenkardiomyozyten auf Kalziumtransient und Phosphorylierung

Prof. Dr. Kornelia Jaquet

20.04.2012

Daniela Bekermann

Advanced Perspectives in the Vapor-Phase Deposition of Multifunctional Metal Oxide Nanomaterials

Prof. Dr. R. A. Fischer

11.05.2012

Jörg Koßmann

Berechnung der Schwingungsspektren von Adsorbaten auf Zinkoxidoberflächen und von Defekten in ZnO

Prof. Dr. C. Hättig

18.05.2012

Christian Kulp

Synthese und Charakterisierung von Kern-Schale-Katalysatoren für die Sauerstoffreduktion

Prof. Dr. M. Bron

25.05.2012

Michaela Nebel

Mehrdimensionale elektrochemische Rastermikroskopie zur hochaufgelösten Abbildung lokaler katalytischer Aktivität

Prof. Dr. W. Schuhmann

25.05.2012

Trung Quan Luong

Terahertz and Infrared Spectroscopy of Confined Water

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

01.06.2012

Olga Petrova

Preparation and X-ray absorption-based characterisation of nano-phased carbon supported Pt-alloy electrocatalysts for proton exchange membrane fuel cells

Prof. Dr. W. Grünert

26.06.2012

Vadim Schott

Untersuchungen von oxidierten Messing- und kupferbedampften ZnO-Oberflächen -
Modellsysteme für das Verständnis der Methanolsynthese an ZnO-geträgerten Cu-Partikeln
Prof. Dr. Ch. Wöll
18.07.2012

Vira Vasylyeva

Ordnungsphänomene im Festkörper von Pyridinderivaten mit schwach dirigierenden
Deuterium- und Fluorsubstitutionen
Dr. K. Merz
20.07.2012

Sergiy Borodin

Präparation und Charakterisierung von Metalloxidoberflächen für grundlegende
Untersuchungen der Selbstorganisation von Phosphonsäuren
Prof. Dr. M. Stratmann
25.07.2012

Artjom Maljusch

Integrated Scanning Kelvin probe - Scanning Electrochemical Microscopy system: design,
development and applications
Prof. Dr. W. Schuhmann
28.08.2012

Aleksandar Zeradjanin

Efficiency of Electrocatalytic Gas Evolution on Transition Metal-Oxides - from Spatial
Distribution of Morphological Pattern Towards Understanding of Electrocatalysis as
Resonance Phenomenon
Prof. Dr. W. Schuhmann
28.08.2012

Florian Brüsselbach

Untersuchung des Histamin- und beta-Alaninkreislaufs im visuellen System von *Drosophila melanogaster*
Prof. Dr. B. Hovemann
12.09.2012

Johanna Ingrid Niesel

CO release properties and biological activity of manganese tricarbonyl complexes
Prof. Dr. N. Metzler-Nolte
24.09.2012

Lukasz Raszeja

Luminescent Phenanthridinyl-Containing Rhenium Tricarbonyl Complexes - About Cellular
Imaging, Biological Activity and Functional Labels for Peptide Nucleic Acids and Peptides
Prof. Dr. N. Metzler-Nolte
05.10.2012

Jan Niklas Meine

Novel Routes for the Catalytic Depolymerization of Cellulose

Prof. Dr. F. Schüth

26.10.2012

Tobias Bäcker

Funktionelle ionische Flüssigkeiten

Prof. Dr. A.-V. Mudring

26.10.2012

Guido Hermann Roßmüller

Dichtefunktional- und Wellenfunktionsrechnungen zum Mechanismus der Methanolsynthese an ZnO

Prof. Dr. C. Hättig

16.11.2012

Shanshan Wang

Copper Colloid-Based Catalysts for Methanol Synthesis

Prof. Dr. F. Schüth

22.11.2012

Siddhartha Paul

Development of a multi-copy bead display approach and its application in \$in vitro\$ evolution of proteins and nucleic acids

Prof. Dr. med. K. Überla

23.11.2012

Daniel Henrik Friese

Analytische zweite Ableitungen für RI-CC2- und RI-MP2-Grundzustandsenergien

Prof. Dr. C. Hättig

23.11.2012

Justus Masa

Synthesis, design and characterization of metalloporphyrines, polymer-metal composites and metal-free catalysts for oxygen reduction

Prof. Dr. W. Schuhmann

30.11.2012

Rachel Elizabeth Glaves

Understanding Enzymatic Reaction Mechanisms using QM/MM Simulations Hydrolysis of Nucleotides in Solution and in hGBP1

Prof. Dr. D. Marx

30.11.2012

Nina von Prondzinski

Ionische Flüssigkeiten zur Darstellung von Funktionsmaterialien

Prof. Dr. A.-V. Mudring

07.12.2012

Katharina Jockers

Mehrdimensionale *in-cell* & SAR by NMR-Studien zur funktionellen Charakterisierung der kleinen GTPase Rheb
Prof. Dr. Raphael Stoll
14.12.2012

Angélique Bétard

Growth and Chemistry of Metal-Organic Framework Thin Films: Toward Functional Coatings
Prof. Dr. R. A. Fischer
17.12.2012

Klaus Kock

Biomolekulare Mechanismen der Ras-gesteuerten Apoptose
Prof. Dr. Ch. Herrmann
17.12.2012

Adinarayana Doddi

Synthesis and Structures of Low Valent Gallium (I) Supported Organometallic Compounds and New Organometallic Routes to Intermetallic Nickel-Gallium Nanoparticles
Prof. Dr. R. A. Fischer
17.12.2012

David Silber

Untersuchung der Adsorption von kurzkettigen Alkoholen auf der r-TiO₂(110)-Oberfläche
Prof. Dr. Ch. Wöll
19.12.2012

Chantal Pia Lorbeer

Light converting materials from ionic liquids
Prof. Dr. A.-V. Mudring
20.12.2012