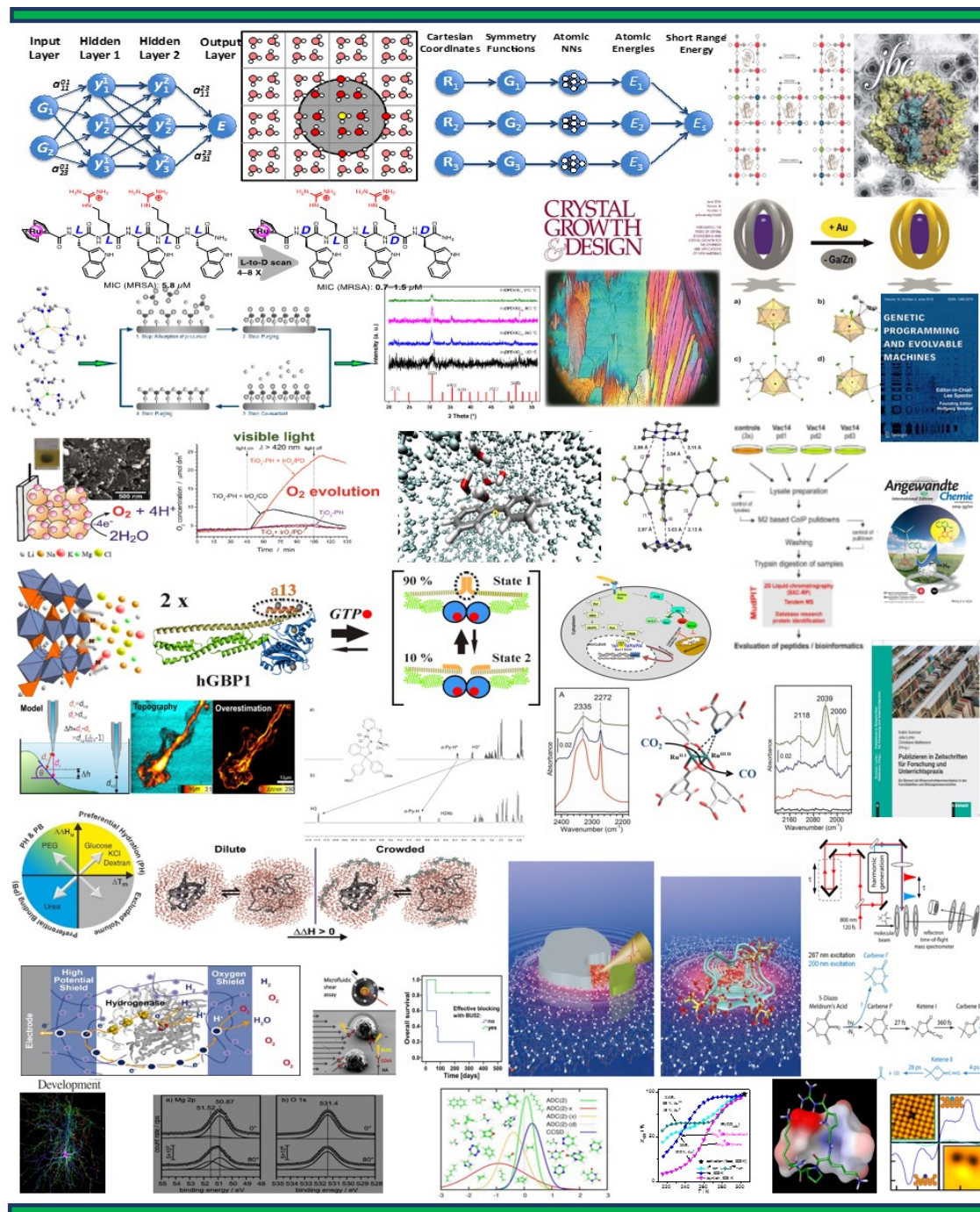


Ruhr-Universität Bochum

Fakultät für Chemie und Biochemie

Forschung 2014



Research 2014

Faculty of Chemistry and Biochemistry

Ruhr-Universität Bochum

Another year has passed, in which the scientific work groups at the Faculty of Chemistry and Biochemistry of the Ruhr-Universität Bochum have again accomplished a lot. This report highlights the diversity of research performed in the year 2014.

In this year, the report has been organized by the participants of the internship "Introduction to the Scientific Community" (ITSC) for the first time. Master students have been in contact with the principle investigators of the faculty, collecting the highlights and assembling them to this report. This was a valuable experience for all students involved within this project, initiating knowledge exchange between students and researchers. In addition, it helped us to improve many important secondary skills such as organization, communication, group work, leadership, scientific publication editing, and many others.

For more information on the scientific content of this volume you are welcome to contact the research groups directly by following the links, email addresses or telephone numbers provided in the research highlights. Or you just visit the website of our faculty at www.chemie.rub.de.

We hope you enjoy the reading.

With the best wishes,

Faculty Report Editorial Office (FREO) Team of the ITSC internship 2014/15

Analia Chamorro

Alex Carvalho

Patrick Wonner

Beispiele aus der Forschung

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I

Prof. Dr. Nils Metzler-Nolte	1
Dr. Klaus Merz.....	2

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2

Prof. Dr. Roland A. Fischer	3
Prof. Dr. Anjana Devi	4
Prof. Dr. Radim Beránek	5

Lehrstuhl für Organische Chemie 1

Prof. Dr. Stefan M. Huber.....	6
Prof. Dr. John S. McCaskill	7

Lehrstuhl für Organische Chemie 2

Prof. Dr. Wolfram Sander	8
Prof. Dr. Gerald Dyker.....	9
Dr. Christian Merten	10

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1

Prof. Dr. Karina Morgenstern	11
Prof. Dr. Christian Herrmann.....	12

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 2

Prof. Dr. Martina Havenith	13
Prof. Dr. Simon Ebbinghaus	14
Prof. Dr. Patrick Nuernberger	15

Lehrstuhl für Analytische Chemie

Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann.....	16
Prof. Dr. Axel Rosenhahn	17
Dr. Dirk Wolters	18
Dr. Fabio La Mantia.....	19

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Dominik Marx.....	20
PD Dr. Jörg Behler.....	21
Prof. Dr. Christof Hättig	22
Prof. Dr. Volker Staemmler	23
Prof. Dr. Robert Franke	24
Prof. Dr. Lars Schäfer	25

Lehrstuhl für Technische Chemie

Prof. Dr. Martin Muhler	26
Prof. Dr. Wolfgang Grünert	27
Dr. Yuemin Wang	28
Dr. Jennifer Strunk	29

Lehrstuhl für Biochemie 1

Prof. Dr. Michael Hollmann	30
----------------------------------	----

Lehrstuhl für Biochemie 2

Prof. Dr. Rolf Heumann	31
Prof. Dr. Irmgard Dietzel-Meyer	32
Prof. Dr. Raphael Stoll	33
Prof. Dr. Bernhard Hovemann	34

Didaktik der Chemie

Prof. Dr. Katrin Sommer	35
-------------------------------	----

ITN BIOENERGY	36
---------------------	----

Veröffentlichungen

Anorganische Chemie 1	37
Anorganische Chemie 2	38
Organische Chemie 1	41
Organische Chemie 2	42
Physikalische Chemie 1	43
Physikalische Chemie 2	44
Analytische Chemie	46
Theoretische Chemie	50
Technische Chemie	53
Biochemie 1	56
Biochemie 2	57
Didaktik der Chemie	57

Promotionen 2014	59
-------------------------------	----

Prof. Dr. Nils Metzler-Nolte

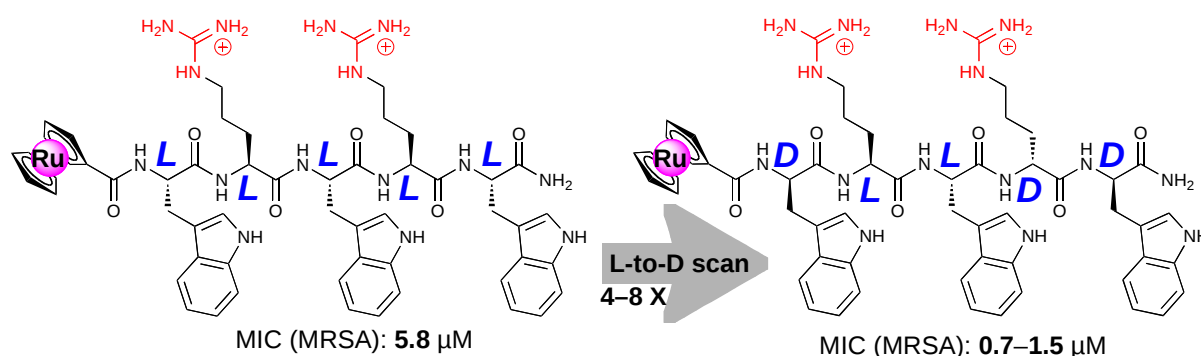
Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

H. B. Albada, P. Prochnow, S. Bobersky, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *Chem. Sci.* **5** (2014) 4453 – 4459. Highly active antibacterial ferrocenoylated or ruthenocenoylated Arg-Trp peptides can be discovered by an L-to-D substitution scan

The rapid increase in resistance against common antibiotics calls for the development of novel antibiotics, particularly against multi-resistant bacteria such as the methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA). In this work, we have prepared metallocenoyl derivatives of two libraries of short antimicrobial peptides (AMPs), resulting in organometallic-AMP derivatives with as yet unparalleled antibacterial activities. In addition, these organometallic AMPs only cause limited lysis of human red blood cells (hRBCs). Our structure–activity relationship (SAR) study on these metallocenoylated peptides showed that specific combinations of L- and D-amino acid residues result in peptides with significantly improved antibacterial activity. We have hereby performed a systematic and highly successful SAR optimization against the two crucial parameters, i.e. antibacterial activity and hemolysis. Importantly, some of the ruthenocene-derivatized peptides presented here are among the most active antibacterial peptides ever; they approach or even exceed the activity of the clinically established peptide antibiotic vancomycin.



Die rasante Zunahme von Resistenzen gegen marktübliche Antibiotika macht die Entwicklung neuer Antibiotika notwendig, insbesondere gegen multi-resistente Erreger wie Methicillin-resistente *Staphylococcus aureus* Keime (MRSA). In dieser Arbeit haben wir Metallocenoyl-Derivate von zwei Bibliotheken kurzer antimikrobiell aktiver Peptide (AMPs) hergestellt. Dabei fanden wir organometallische AMPs mit bisher unerreichter antibakterieller Aktivität. Darüber hinaus verursachen unsere neuen organometallischen AMPs nur sehr geringe Hämolyse von roten Blutkörperchen (hRBCs). Eine detaillierte Struktur-Wirkungs-Analyse (SAR) zeigt, daß ganz spezifische Kombinationen von L- und D-Aminosäuren für die verbesserte Wirkung dieser Peptide notwendig sind. Wir haben damit eine systematische SAR-Optimierung gegen zwei wichtige Parameter, nämlich antibakterielle Aktivität und Hämolyse, erfolgreich durchgeführt. Wichtig ist darüber hinaus, daß die aktivsten von uns hier gefundenen Ruthenocen-AMP-Derivate zu den aktivsten AMPs überhaupt gehören, sie erreichen und übertreffen sogar die Aktivität des klinisch etablierten Peptid-Antibiotikums Vancomycin.

Dr. Klaus Merz

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

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

email: Klaus.Merz@rub.de; <http://www.chemie.rub.de/ac1/merz>

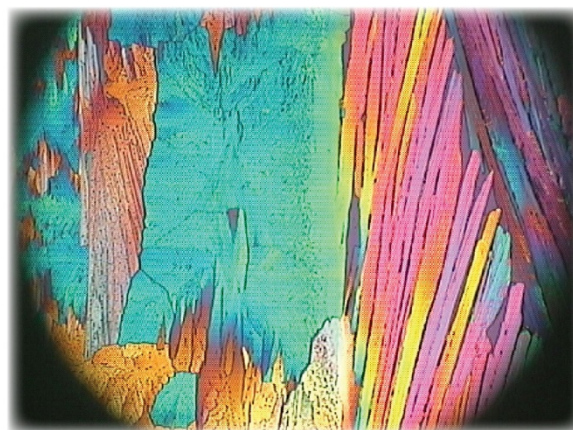
A. Kupka, C. Schauerte, K. Merz, *Crystal Growth & Design*, **14** (2014) 2985–2989. Isostructural Crystallization Behavior of Dihydroanthracene and Dihydroacridine

The crystal packing motifs of acenes are usually built up by heringbone C-H $\cdots\pi$ interactions, on the contrary, N-heteroacenes form C-H $\cdots$ N contacts. In the case of dihydroacene and dihydroanthracene the molecular structure of a rigid aromatic system is interrupted by a flexible part. The influence of heterocyclic CH₂/NH substitution on the crystallization behavior and crystal packing of 9,10-dihydroacridine (DHAC) and 9,10-dihydroanthracene (DHAN) as well as a 1:1 mixture of both compounds was investigated by DSC-measurements, hot stage microscopy methods and crystal structure determination. From the presented data it is obvious that the examined compounds DHAN and DHAC crystallize isostructurally. While the non-hydrogenated acridine and anthracene compounds crystallize in different structures and are dominated by very different interactions, DHAC and DHAN form the same building blocks despite the CH₂/NH-substitution and changes in the molecular geometry at the central bridge atom. It has also been shown that mixtures of DHAC and DHAN form solid solutions in all proportions which are isostructural to the single compounds.

CRYSTAL
GROWTH
& DESIGN

June 2014
Volume 14
Number 6
pubs.acs.org/crystal

INTEGRATING THE
FIELDS OF CRYSTAL
ENGINEERING AND
CRYSTAL GROWTH FOR
THE SYNTHESIS
AND APPLICATIONS
OF NEW MATERIALS



Cover *Crystal Growth & Design* June 2014
Cryst. Growth Des. **2014**, *14*, 2985–2989.

Die Kristallpackungsmotive von Acene werden in der Regel durch CH $\cdots\pi$ Wechselwirkungen dominiert, dagegen bilden N-Heteroacene intermolekulare CH $\cdots$ N Kontakte aus. Im Fall von Dihydroacenen und -anthracenen sind zwei starre Molekülstrukturblöcke durch eine flexible Einheit CH₂ bzw. NH verbunden. Der Einfluss der heterocyclische CH₂/NH Substitution auf das Kristallisationsverhalten und die Kristallpackung von 9,10-Dihydroacridin (DHAC) und 9,10-Dihydroanthracen (DHAN) sowie eine 1:1-Gemisch der beiden Verbindungen wurde mittels DSC-Messungen, Heitzschmikroskopiemethoden sowie Kristallstrukturbestimmung untersucht. Aus den ermittelten Daten ist ersichtlich, dass die untersuchten Verbindungen DHAN und DHAC isostrukturell kristallisieren. Während die nicht-hydrierten Acridine und Anthracene in unterschiedlichen Packungsmotiven kristallisieren, wirkt sich CH₂/NH-Substitution am zentralen Brückenatom, trotz daraus resultierender veränderter Molekülgeometrie, nicht auf die Ausbildung der Kristallstrukturen aus. Es zeigt sich, dass Mischungen von DHAC und DHAN in allen Verhältnissen feste Lösungen bilden, die isostrukturell zu den Einzelverbindungen sind.

Prof. Dr. Roland A. Fischer

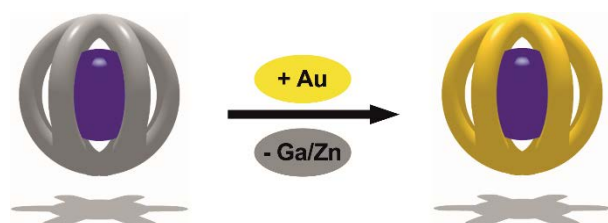
Anorganische Chemie II – Organometallics & Materials Chemistry

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/acii2/>

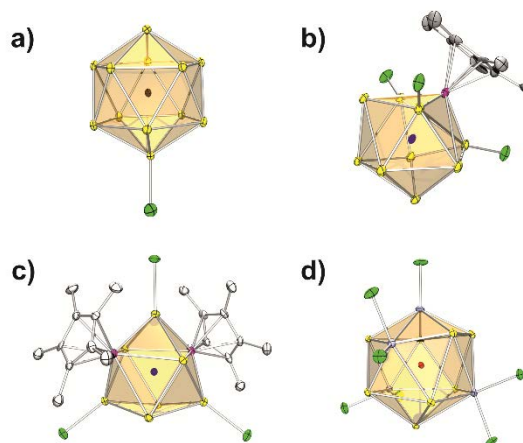
A. Puls, P. Jerabek, W. Kurashige, M. Förster, M. Molon, T. Bollermann, M. Winter, C. Gemel, Y. Negishi, G. Frenking, R. A. Fischer, „A New Synthesis Concept for Multiply Doped Gold Clusters $[(M@Au_nM'_m)L_k]^{q+}$ “, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, 53, 4327-4331”.



$[Au_{55}(PPh_3)_{12}Cl_6]$, discovered in 1981, are today's textbook knowledge. Au-clusters are important for catalysis, fuel-cells, bio-sensing and labeling, molecular electronics etc. The incorporation of hetero metal atoms allows fine-tuning of the properties. We discovered a novel transmetallation access to multiply doped ligand stabilized Au-clusters a) $Pt@Au_{12}$, b) $Ni@Au_9Al$, c) $Ni@Au_7Al_2$, d) $Mo@Au_8Ga_4$ (PR_3 ligands are omitted in the figure). The concept is based on our library of intermetalloid molecules $[M@M'_a]R_a$ ($a = 8-12$; $M = d$ -metal; $M' = Zn, Ga$; $R = Me, Et, Cp^*$). The computational analysis (EDA-NOCV) matches the empirical design rule of the compounds based on the 18 ve count of the interstitial metal atom M of $\{[M@Au_nM'_m]L_k\}^{q+}$ ($k \geq n+m \geq 9$). In addition the clusters are matching the unified Jellium super-atom model.

Every atom counts in metal clusters, their core composition and ligand shell are crucial factors for their physical and chemical properties.

Gold is among the most heavily studied cluster metals and the famous magic number clusters $[Au_{13}(PMe_2Ph)_{10}Cl_2](PF_6)_3$ and



In Metall-Clustern kommt es auf jedes Atom an. Die Zusammensetzung des Kerns und die stabilisierende Ligandenhülle bestimmen die physikalischen und chemischen Eigenschaften. Gold ist eines der am besten untersuchten Cluster-Metalle und die berühmten Magische-Zahl Cluster $[Au_{13}(PMe_2Ph)_{10}Cl_2](PF_6)_3$ und $[Au_{55}(PPh_3)_{12}Cl_6]$, aus dem Jahre 1981, sind heute Lehrbuchwissen. Au-Cluster sind interessant für die Katalyse, für Brennstoffzellen, für Biosensoren, Biomarker, und für die molekulare Elektronik. Der Einbau von Heterometall-Atomen erlaubt die Feinabstimmung der Eigenschaften. Wir entdeckten eine neuartige Transmetallierungs-Reaktion als Zugang zu bisher nicht möglichen, mehrfach dotierten Ligand-stabilisierten Goldclustern, z.B.: a) $Pt@Au_{12}$, b) $Ni@Au_9Al$, c) $Ni@Au_7Al_2$, d) $Mo@Au_8Ga_4$ (PR_3 sind in der Abbildung weggelassen). Das Konzept basiert auf unserer Bibliothek intermetalloider Moleküle $[M@M'_a]R_a$ ($a = 8-12$; $M = d$ -metal; $M' = Zn, Ga$; $R = Me, Et, Cp^*$). Die theoretische Analyse (EDA-NOCV) bestätigt die empirische Regel für die Zusammensetzung der Verbindungen auf der Basis einer 18 VE Konfiguration für das zentrale Metall M in den Clustern $\{[M@Au_nM'_m]L_k\}^{q+}$ ($k \geq n+m \geq 9$). Außerdem erfüllen die Systeme das verallgemeinerte Jellium Überatom-Modell.

Prof. Dr. Anjana Devi

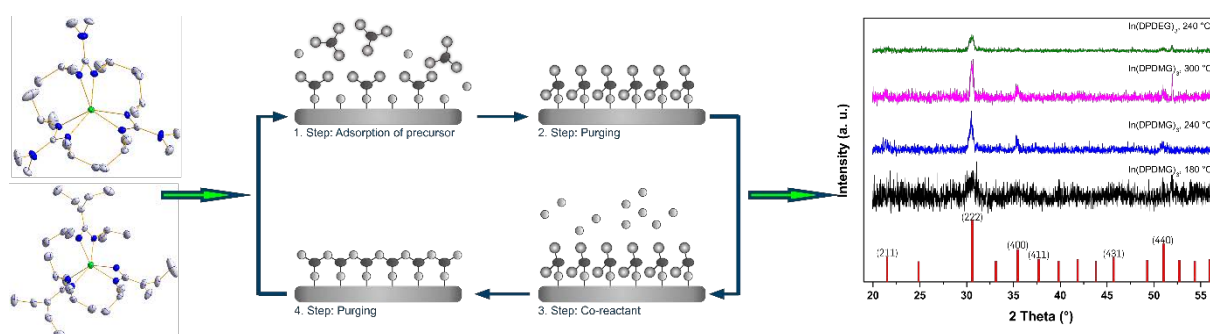
AG Chemie Anorganischer Materialien; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

M. Gebhard, M. Hellweg, H. Parala, K. Xu, M. Winter, A. Devi, *Dalton Trans.* **43** (2014) 937-940. Indium-tris-guanidinate: a promising class of precursors for water assisted atomic layer deposition of In_2O_3 thin films.

Two closely related mononuclear homoleptic indium-tris-guanidinate complexes, deviating in their outer amido-group, have been synthesized and characterized regarding their properties as precursors for atomic layer deposition (ALD) of In_2O_3 . ALD is, in contrast to “normal” CVD, a discontinuous process, driven by surface saturation of the substrate. Therefore, precursors must exhibit a suitable combination of thermal stability and reactivity to each other as to the underlying surface. In our study, this was achieved by the coordination of three bulky bidentate guanidinate ligands to a central indium atom. For tris-(N,N'-diisopropyl-2-dimethylamidoguanidinato)-indium(III), a maximum growth rate of 0.73 Å/cycle was found in an optimized water-assisted ALD setup and polycrystalline films were obtained even at low temperatures. The bigger tris-(N,N'-diisopropyl-2-diethylamido-guanidinato)-indium(III) precursor gave a maximum GPC of 0.27 Å/cycle. Deposited thin films of In_2O_3 showed high transparency in the optical range with an optical band gap around 3.5 eV.



Zwei eng verwandte, einkernig sowie homoleptische Indium-tris-guanidinate-Komplexe, die sich lediglich in ihren äußeren Amidogruppen unterscheiden, sind synthetisiert und hinsichtlich ihrer Eigenschaften als Precursor zur Atomlagenabscheidungen (ALD) von In_2O_3 charakterisiert worden. Im Gegensatz zur „normalen“ CVD handelt es sich bei ALD um einen diskontinuierlichen Prozess, der vor Allem auf Oberflächensättigung beruht. Precursor müssen deshalb eine geeignete Kombination zwischen thermischer Stabilität und Reaktivität, sowohl zu einander als auch zum zu Grunde liegenden Substrat, aufweisen. In unserer Arbeit wurde dies durch die Koordination dreier sperriger Guanidinatliganden um ein zentrales Indiumatom herum ermöglicht. Die Verbindung Tris-(N,N'-diisopropyl-2-dimethylamidoguanidinato)-Indium(III) weist in einem Wasser-gestützten ALD-Prozess eine Wachstumsrate von 0.73 Å/Zyklus auf, wobei selbst bei 180 °C polykristalline Schichten abscheiden werden konnten. Der größere Precursor, Tris-(N,N'-diisopropyl-2-diethylamido-guanidinato)-Indium(III), zeigt eine maximale Wachstumsrate von 0.27 Å/Zyklus auf. Die abgeschiedenen In_2O_3 Dünnschichten weisen eine hohe Transparenz im sichtbaren Wellenlängenbereich bei einer optischen Bandlücke von ca. 3.5 eV auf.

JP Dr. Radim Beránek

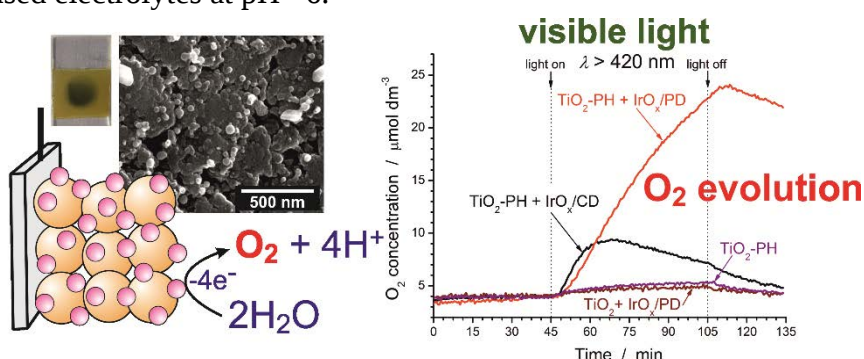
Anorg. Chem. II - Photoactive Materials; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: radim.beranek@rub.de; <http://www.rub.de/photochem>

M. Bledowski, L. Wang, S. Neubert, D. Mitoraj, R. Beranek, *J. Phys. Chem. C* **118** (2014) 18951–18961. Improving the Performance of Hybrid Photoanodes for Water Splitting by Photodeposition of Iridium Oxide Nanoparticles.

The efficient coupling between light-harvesting absorbers and co-catalysts allowing for chemical transformation along multi-electron pathways is of fundamental importance for the development of solar fuel-producing photochemical systems. In this paper we demonstrate that IrO_x nanoparticles acting as efficient co-catalyst for water oxidation can be photoelectrochemically deposited from [Ir(OH)₆]²⁻ solutions into the porous structure of TiO₂-PH (polyheptazine, "graphitic carbon nitride") hybrid photoanodes for water photooxidation. As compared to photoanodes loaded with IrO_x by conventional colloidal deposition method, hybrid photoanodes with photodeposited IrO_x exhibit significantly enhanced dioxygen evolution under long-term irradiation with visible light ($\lambda > 420$ nm). Photocurrent transient measurements show that the undesired accumulation of holes in the TiO₂-PH absorber is significantly reduced due to improved coupling between the absorber and the photodeposited co-catalyst. This decreases significantly the recombination rate, leads to more efficient dioxygen evolution, and improves the stability against photocorrosion. The performance and stability of hybrid photoanodes is also found to be drastically influenced by the solution chemistry (electrolyte composition and pH). The highest photoconversion efficiency was observed in sulfate-based electrolytes at pH ~6.



Die effiziente Kopplung zwischen Lichtabsorber und Cokatalysatoren für Multielektrontransferprozesse ist von grundlegender Bedeutung in artifiziellen Systemen für die Umwandlung von Sonnenenergie in solare Brennstoffe. In diesem Beitrag zeigen wir, dass IrO_x Nanopartikel, die als effiziente Cokatalysatoren für die Wasseroxidation wirken, photoelektrochemisch aus Lösungen von [Ir(OH)₆]²⁻ in die poröse Struktur von TiO₂-PH (Polyheptazine, "graphitischer Kohlenstoffnitrid") Hybridphotoanoden abgeschieden werden können. Im Vergleich zu Photoanoden mit IrO_x aus herkömmlicher kolloidaler Abscheidung, weisen die Hybridphotoanoden mit photoelektrochemisch abgeschiedenem IrO_x eine viel effizientere Sauerstoffentwicklung unter sichtbarem Licht ($\lambda > 420$ nm) auf. Die Messungen von Photostromtransienten zeigen, daß die unerwünschte Kumulation von Löchern in dem Hybridabsorber erheblich reduziert wird, was auf eine verbesserte Kopplung zwischen dem Absorber und dem photoabgeschiedenen Cokatalysator zurückzuführen ist. Dabei wird auch die Rekombinationsrate deutlich verringert, was zur effizienteren Sauerstoffentwicklung und verbesserter Stabilität gegen Photokorrosion führt. Die Aktivität und Stabilität der Hybridphotoanoden wird auch von der Elektrolytzusammensetzung und dem pH-Wert stark beeinflusst. Die höchste Photoeffizienz wurde in Sulfatelektrolyten bei pH 6 gefunden.

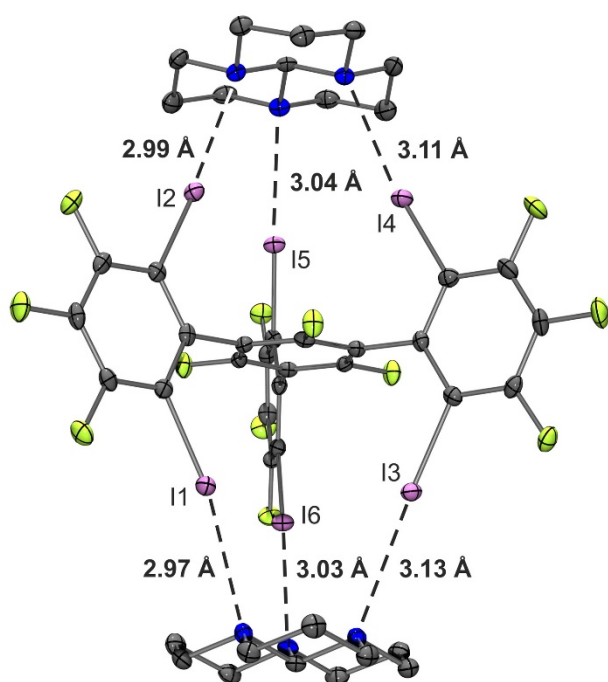
Prof. Dr. Stefan M. Huber

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

Tel.: ++49-(0)234-3221584;

email: stefan.m.huber@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc1/huber>

S. H. Jungbauer, D. Bulfield, F. Kniep, C. W. Lehmann, E. Herdtweck, S. M. Huber, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 16740-16743. Toward Molecular Recognition: Three-Point Halogen Bonding in the Solid State and in Solution



Most reports on halogen bonding so far feature a 1:1 interaction between the halogen bond donor (i.e., the halogen-based Lewis acid) and the Lewis base. However, the molecular recognition of Lewis bases by XB donors could be improved by *multipoint* interactions, i.e. the binding of multiple XB donating sites on one molecule to multiple electron-rich sites on the Lewis base. In this paper, a well-defined three-point interaction based solely on halogen bonding is presented. X-ray structural analyses of tridentate halogen bond donors with a carefully chosen triamine illustrate the ideal geometric fit of the Lewis-acidic axes of the former with the Lewis basic centers of the latter. Titration experiments reveal that the corresponding binding constant is about three orders of magnitude higher than that with a compara-

ble monodentate amine. Other, less perfectly fitting multidentate amines also bind markedly weaker. Multi-point interactions like the one presented herein are the basis of molecular recognition, and we expect this principle to further establish halogen bonding as a reliable tool for solution-phase applications.

Die meisten Anwendungen von Halogenbrücken basieren auf 1:1-Wechselwirkungen zwischen dem Halogenbrückendonator (d.h. einer halogen-basierten Lewis-Säure) und einer Lewis-Base. Die molekulare Erkennung von Lewis-Basen durch Halogenbrückendonoren könnte aber deutlich verbessert werden, wenn Mehrpunktwechselwirkungen zum Einsatz kämen. In diesem Paper wird eine hochdefinierte Dreipunktwechselwirkung vorgestellt, die ausschließlich auf Halogenbrücken beruht. Röntgenstrukturanalysen der dreibindigen Halogenbrückendonoren mit sorgfältig gewählten Triaminen veranschaulichen den idealen Fit der jeweiligen Lewis-aciden und -basischen Zentren zueinander. Die durch Titrationsexperimente erhaltenen Bindungskonstanten solcher Komplexe sind um ca. drei Größenordnungen höher als diejenigen monodentater Amine. Auch andere mehrbindige Amine, deren Geometrie weniger gut zur Lewis-Säure passt, binden wesentlich schlechter. Die hier vorgestellten Mehrpunktwechselwirkungen sollen weiter dazu beitragen, Halogenbrücken als zuverlässige Wechselwirkungen für Anwendungen in Lösung zu etablieren.

Prof. Dr. John S. McCaskill

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

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

email: John.McCaskill@rub.de ; http://www.biomip.ruhr-uni-bochum.de/team/john_mccaskill.html

U. Tangen, J. S. McCaskill, *Genetic Programming and Evolvable Machines*, **15** (2014) 343-374. On evolvability and robustness in the matrix-GRT model



Quantifying evolution and understanding robustness are best done with a system that is both rich enough to frustrate rigging of the answer and simple enough to permit comparison against either existing systems or absolute measures. Such a system is provided by the self-referential model matrix-genome, replication and translation, based on the concept of operators, which is introduced here. Ideas are also taken from the evolving micro-controller research. This new model replaces micro-controllers by simple matrix operations. These matrices, seen as abstract proteins, work on abstract genomes, peptides or other proteins. Studying the evolutionary properties shows that the protein-only hypothesis (proteins as active elements) shows poor evolvability and the RNA-before-protein hypothesis (genomes controlling) exhibits similar intricate evolutionary dynamics as in the micro-controller model. A simple possible explanation for this surprising difference in behavior is presented. In addition to existing evolutionary models, dynamical and organizational changes or transitions occurring late in long-term experiments are demonstrated.

Prof. Dr. Wolfram Sander

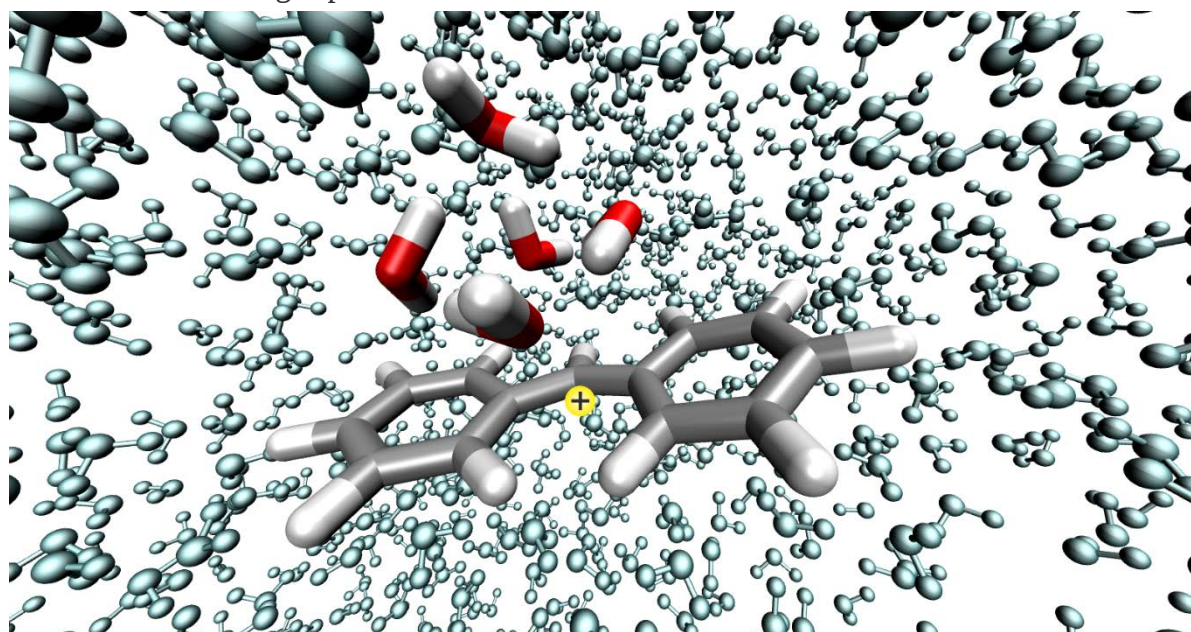
Lehrstuhl für Organische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

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

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

P. Costa, M. Fernandez-Oliva, E. Sanchez-Garcia, W. Sander, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014), 15625-15630. The Highly Reactive Benzhydryl Cation Isolated and Stabilized in Water Ice.

Diphenylcarbene (DPC) shows a triplet ground-state lying approximately 3 kcal/mol below the lowest singlet state. Under the conditions of matrix isolation at 25 K, DPC reacts with single water molecules embedded in solid argon and switches its ground state from triplet to singlet by forming a strong hydrogen bond. The complex between DPC and water is only metastable, and even at 3 K the carbene center slowly inserts into the OH bond of water to form benzhydryl alcohol via quantum chemical tunneling. Surprisingly, if DPC is generated in amorphous water ice at 3 K, it is protonated instantaneously to give the benzhydryl cation. Under these conditions, the benzhydryl cation is stable, and warming to temperatures above 50 K is required to produce benzhydryl alcohol. Thus, for the first time, a highly electrophilic and extremely reactive secondary carbenium ion can be isolated in a neutral, nucleophilic environment avoiding superacidic conditions.



Diphenylcarben (DPC) besitzt einen Triplett Grundzustand, der etwa 3 kcal/mol unter dem tiefsten Singulett Zustand liegt. Unter den Bedingungen der Matrixisolation reagiert DPC bei 25 K mit einzelnen Wassermolekülen, die in festem Argon eingebettet sind, und wechselt seinen Grundzustand von Triplett zu Singulett, indem es eine starke Wasserstoffbrückenbindung ausbildet. Der Komplex zwischen DPC und Wasser ist nur metastabil, und sogar bei 3 K inseriert das Carbenzentrum langsam in die OH-Bindung des Wassers, um durch quantenchemisches Tunneln Benzhydrylalkohol zu bilden. Überraschenderweise wird DPC sofort protoniert und liefert das Benzhydrylkation, wenn DPC in amorphen Wassereis bei 3 K erzeugt wird. Unter diesen Bedingungen ist das Benzhydrylkation stabil, und es bedarf Temperaturen über 50 K, um Benzhydrylalkohol zu bilden. Zum ersten Mal kann also ein hoch elektrophiles und extrem reaktives sekundäres Carbeniumion in einer neutralen, nucleophilen Umgebung ohne supersaure Bedingungen isoliert werden.

Prof. Dr. Gerald Dyker

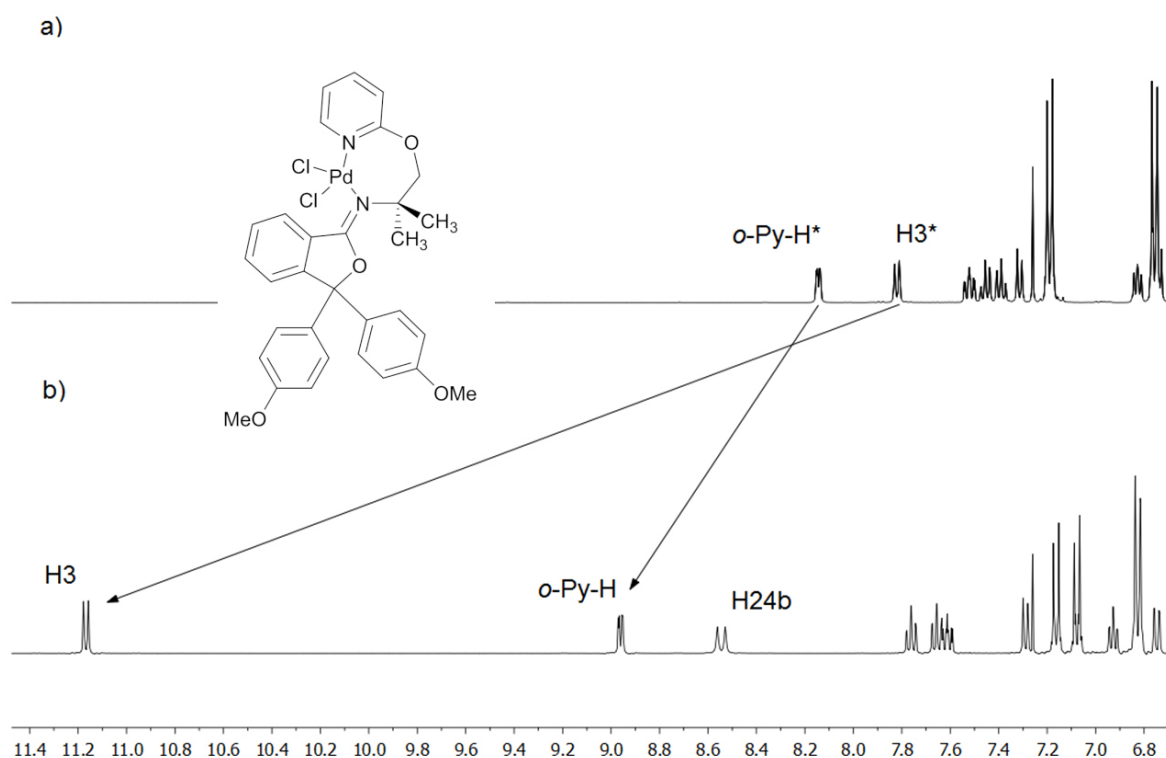
Org. Chem.II - Organische Synthese und Katalyse; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

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

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

S. Schoeler M. Wahl, N. I. C. Wurster, A. Puls, C. Haettig, G. Dyker, *Chem. Commun.* **50** (2014), 5909-5911. Bidentate cycloimidate palladium complexes with aliphatic and aromatic anagostic bonds.

Anagostic interactions, classifying a C-H-transition metal arrangement with a bridging hydrogen, are of mechanistic interest as a prestage to the agostic binding situation as key intermediate in CH-activation processes. Unusual anisotropic shifts in proton NMR spectra are used for the diagnosis of the metal hydrogen interaction.



Partial ¹H NMR spectra (400 MHz, CDCl₃) of (a) the free ligand (b) its complex with PdCl₂.

Anagostische Wechselwirkungen, die eine Kohlenstoff-Wasserstoff-Übergangsmetall-Brücke als Bindungssituation beschreiben, sind als Vorstufe zum agostischen Komplex von Interesse, der wiederum als Schlüsselintermediat bei CH-Aktivierungsprozessen bedeutend ist. Ungewöhnliche anisotrope Verschiebungen der Signale in den ¹H-NMR-Spektren dienen der Diagnose der Wasserstoff-Metall-Wechselwirkung.

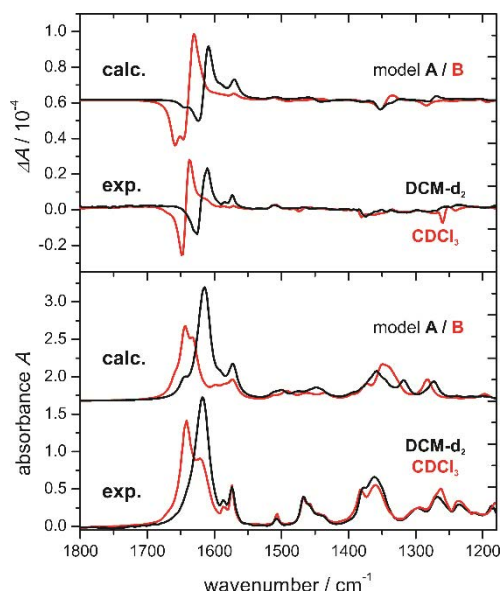
Dr. Christian Merten

Organische Chemie 2; Ruhr-Universität Bochum; D-44801 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224529; FAX: ++49-(0)234-3214353

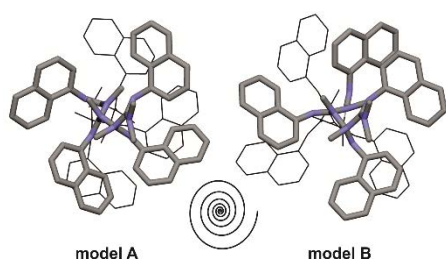
email: christian.merten@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/chirality>

C. Merten, J. F. Reuther, J. D. DeSousa, B. M. Novak, *PCCP* **16** (2014) 11456. Identification of the specific, shutter-like conformational reorientation in a chiroptical switching polycarbodiimide by VCD spectroscopy



The specific conformational states responsible for the unique, reversible temperature- and solvent-driven chiroptical switching process experienced by poly(N-1-naphthyl-N'-octadecyl-carbodiimide) (PNOC) have been identified using VCD spectroscopy and DFT calculations. The distinct VCD spectra of PNOC corresponding to the two specific conformations were obtained for the polymer dissolved in DCM-d₂ (state A) and CDCl₃ (predominantly state B). To specifically assign the structures of both conformations, two simplified 7mer models were constructed and optimized using DFT calculations. The theoretical spectra associated with these model conformations show a high level of agreement when compared to the experimental VCD spectra. The two states consist of the naphthyl pendant groups aligned

directionally opposing the helical rotation (model A) and aligned with the helicity of the backbone (model B). This pendant reorientation causes very large OR and ECD Cotton effect inversions upon modification to the temperature or solvent composition of dilute (+)-PNOC solutions in specific solvents. In addition, the pendant group equilibrium from state A to B causes a contraction of the helical pitch from the more expanded 5/1 pitch to the more contracted 7/2 pitch resulting in increased disorder of the solvation sphere surrounding the polymer chain.



Der optische Drehwert des helikal chiralen Polymers Poly(N-1-naphthyl-N'-octadecyl-carbodiimid) (PNOC) kann durch Temperatur- und Lösungsmittelveränderungen reversibel zwischen zwei Konformeren umgeschaltet werden. Für beide Zustände wurden charakteristische VCD-Spektren in DCM-d₂ (Zustand 1) und CDCl₃ (hauptsächlich Zustand 2) aufgenommen. Die auf Basis zweier vereinfachter Helixmodelle von sieben

Monomereinheiten Länge berechneten VCD Spektren stimmten sehr gut mit den experimentellen Spektren überein, so dass es möglich war, die Konformationsveränderungen detailliert zu erklären. Die zwei Zustände, zwischen denen geschaltet werden kann, unterscheiden sich demnach in der Orientierung der Naphthylgruppen relativ zum Polymerrückgrat. In Modell A sind die Naphthylgruppen entgegengesetzt der Helixrichtung orientiert, wohingegen sie in Modell B in Richtung der Helixwindung zeigen. Diese Orientierungsänderung ist verantwortlich für die starken Änderungen im optischen Drehwert. Die beobachteten Veränderungen in den VCD Spektren können auf eine Änderung der Helixstruktur selbst zurückgeführt werden. Es zeigt sich, dass beim Schalten von Zustand A nach B die Helix von einer 5/1 in eine 7/2 Struktur übergeht und damit gestaucht wird.



Prof. Dr. Karina Morgenstern

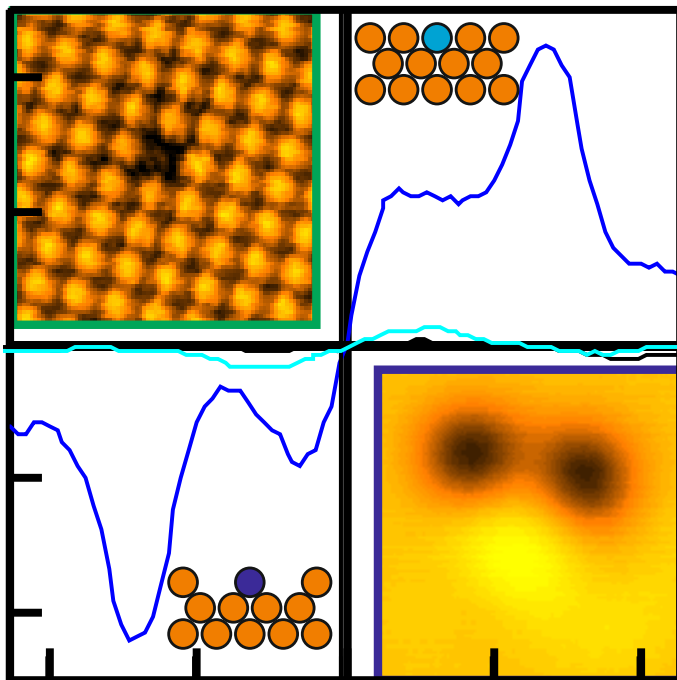
Lehrstuhl für Physikalische Chemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3222925; FAX: ++49-(0)234-3214182

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

K. Volgmann, H. Gawronski, Ch. Zaum, G. Rusina, S. Borisova, E. Chulkov, K. Morgenstern, *Nature Communications* 5 (2014), 5089. Local determination of the amount of integration of an atom into a crystal surface

Material properties are often dominated by defects, in particular on the nanoscale. Local phonon spectroscopy shows that a host atom in a surface influences phonon spectra differently in dependence of the degree of integration of the point defects into the surface.



Collective vibrational modes of crystal lattices, called phonons, determine fundamental material properties, such as their thermal and electrical conductivities. Bulk phonon spectra are influenced by point defects. More recently, the importance of phonons on nanostructures has come into the focus of attention. We explored local variations in phonon spectra induced by point defects via scanning tunneling microscopy, inelastic electron tunneling spectroscopy, and numerical simulations based on embedded atom method calculations. Our study showed that the smallest possible point defect, a missing substrate atom, induces a tiny increase in phonon density of states, which is nonetheless measurable by IETS.

The replacement of a substrate adatom by another species leads to more pronounced change. The largest change is induced by a combination of the two. For the last case, however, the spectra take the form of an individual vibration. Our study thus shows that the smallest possible point defect, a missing substrate atom, shifts the phonon density towards lower energy. The replacement of a substrate adatom by another species leads to an overall increase in phonon density. For a combination of the two, the spectra take the form of localized vibrations. Such local-scale information was not accessible so far and gives unprecedented access into understanding the properties of material on the nanoscale. The first spatially resolved phonon spectra of point defects reveal distinctly different signatures for a cavity alone and an impurity atom fully integrated into the surface as opposed to one placed into a cavity. The spectra are indicative for delocalized phonons and localized vibrations, respectively, as confirmed by theory.

Prof. Dr. Christian Herrmann

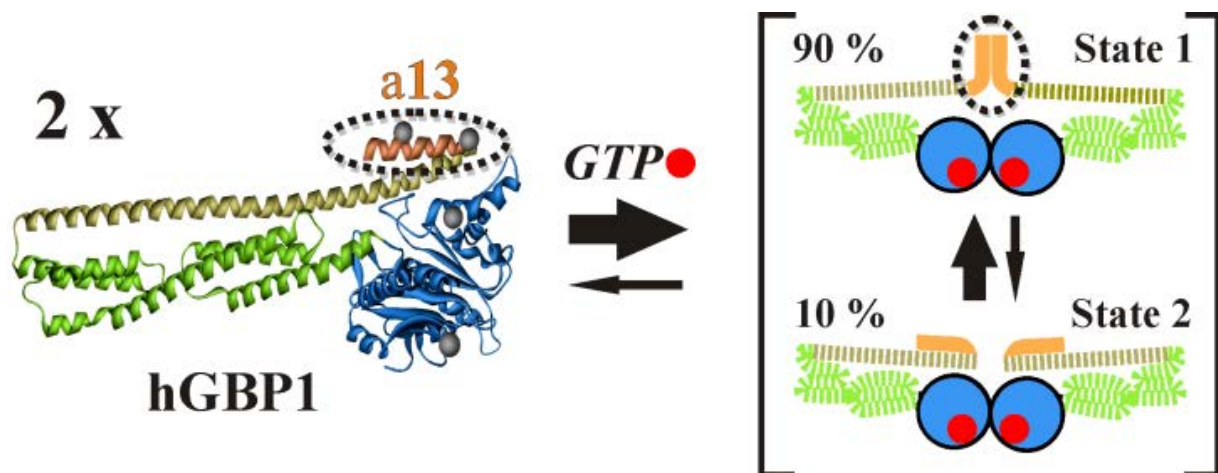
Physikalische Chemie I; AG Protein-Interaktionen; Ruhr-Uni Bochum; D-44780 Bochum

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

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

T. Vöpel, C. S. Hengstenberg, T. O. Peulen, Y. Ajaj, C. A. Seidel, C. Herrmann, J. P. Klare, *Biochemistry* 53 (2014) 4590-4600. Triphosphate Induced Dimerization of Human Guanylate Binding Protein 1 Involves Association of the C-Terminal Helices: A Joint Double Electron-Electron Resonance and FRET Study

Das humane Guanylat-bindende Protein 1 (GBP1) spielt als große GTPase eine Rolle bei der Strukturänderung von Lipidmembranen. Durch spezifische Markierungen des hGBP1 mit FRET- wie auch mit EPR-Sonden und dadurch ermöglichte Doppel-Elektron-Elektron-Resonanz (DEER) und Förster-Resonanz-Energie-Transfer (FRET) Experimente ließen sich Strukturänderungen innerhalb des Proteins untersuchen. Die durch Nukleotidbindung in der Kopfdomäne (blau in der Abbildung) getriggerte Dimerisierung des hGBP1 führt zum Ablösen und zur Umorientierung der C-terminalen, helikalen Domänen (orange), die dann ihrerseits zur Verstärkung des Dimerkomplexes beitragen. Zusammen mit dem am C-Terminus angehängten Farnesylrest sollte dies starken Einfluss auf die Membranbindung haben.



Human guanylate binding protein 1 (hGBP1) is a member of the dynamin superfamily of large GTPases. During GTP hydrolysis the protein undergoes structural changes leading to self-assembly. Previous studies have suggested dimerization of the protein by means of its large GTPase domain (blue in figure above) and significant conformational changes in helical regions near this domain and at its C-terminus. We used site-directed labeling and a combination of pulsed electron paramagnetic resonance and time-resolved fluorescence spectroscopy for structural investigations on hGBP1 dimerization and conformational changes of its C-terminal helix $\alpha 13$ (orange). Consistent distances obtained by double electron-electron resonance (DEER) spectroscopy and Förster-Resonance-Energy-Transfer (FRET) measurements using model free analysis approaches revealed a close interaction of the two $\alpha 13$ helices in the hGBP1 dimer formed upon binding of the non-hydrolyzable nucleoside triphosphate derivate GppNHp. In molecular dynamics (MD) simulations, these two helices form a stable dimer in solution. Our data show that dimer formation of hGBP1 involves multiple spatially distant regions of the protein, namely the N-terminal LG domain and the C-terminal helices $\alpha 13$. The contacts formed between the two $\alpha 13$ helices and the resulting juxtaposition are expected to be a key step for the physiological membrane localization of hGBP1 through the farnesyl groups attached to the end of $\alpha 13$.

Prof. Dr. Martina Havenith

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

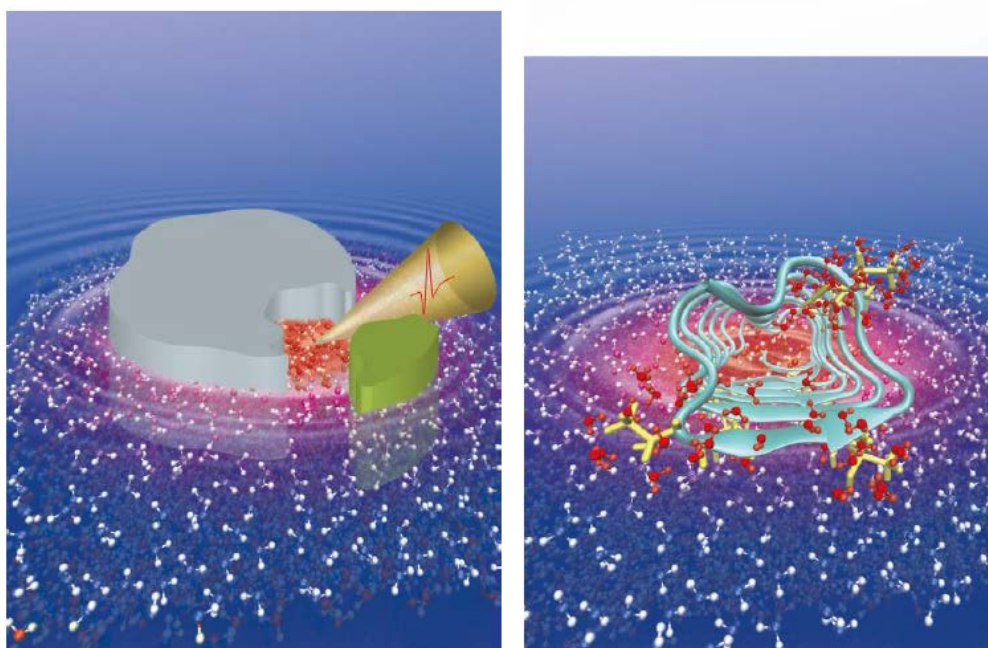
Tel.: ++49-(0)234-3224249; FAX: ++49-(0)234-xxxx

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

V. Conti Nibali, M. Havenith, *JACS* **136**(37) (2014) 12800-12807. New insights into the role of water in biological function: Studying solvated biomolecules using terahertz absorption spectroscopy in conjunction with molecular dynamics simulations.

In life science water is the ubiquitous solvent, sometimes even called the “matrix of life”. There are more and more experimental and theoretical evidences that solvation water is not a passive spectator in biomolecular processes. New experimental techniques can quantify how water interacts with biomolecules and differs from “bulk” water. Terahertz (THz) absorption spectroscopy has turned out to be a powerful tool to study (bio)molecular hydration.

Recent findings show the significance of hydrogen bond dynamics for the function of anti-freeze proteins, and for molecular recognition. In all these examples a gradient of water motions towards functional sites of proteins is observed, the so-called “hydration funnel”. By means of molecular dynamics (MD) simulations, we provide new evidences for a specific water-protein coupling as the cause of the observed dynamical heterogeneity. The efficiency of the coupling at THz frequencies is explained in terms of a two-tier (short- and long-range) solute-solvent interaction.



In den Lebenswissenschaften ist Wasser von besonderer Bedeutung und wird auch als Matrix des Lebens bezeichnet. Es gibt mehr und mehr experimentelle und theoretische Hinweise darauf, dass Wasser nicht nur eine passive Beobachterrolle zukommt. Neue experimentelle Techniken erlauben nun eine Bestimmung wie das Biomolekül mit dem Wasser wechselwirkt und inwieweit es sich das Hydratwasser von „normalen“ Wasser unterscheidet. Terahertz (THz) Absorptionsspektroskopie hat sich als leistungsstarke Methode herausgestellt um dies zu quantifizieren. Wir konnten die Bedeutung des Beitrags der Wasserstoffbrückenbindungs-dynamik für die Funktion von Antifrierproteinen und für die molekulare Erkennung zeigen. In allen Fällen wurde eine Gradient der Wasserbewegungen hin zu der Andockstelle beobachtet, der sogenannte “hydration funnel”.

Prof. Dr. Simon Ebbinghaus

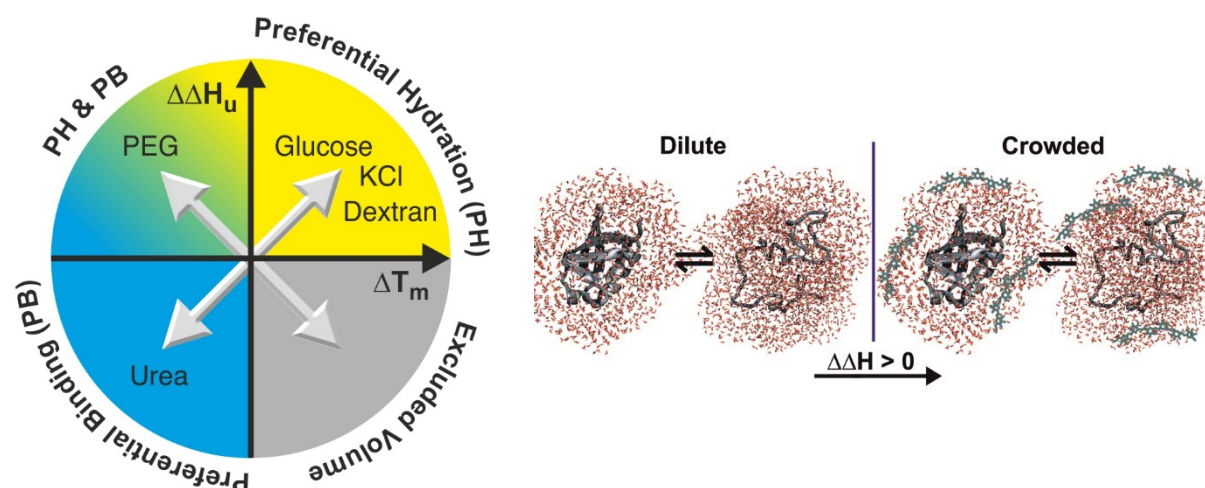
Lehrstuhl für Physikalische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

M. Senske, L. Törk, B. Born, M. Havenith, C. Herrmann, S. Ebbinghaus, *Journal of the American Chemical Society* **136** (2014) 9036-9041. Protein Stabilization by Macromolecular Crowding through Enthalpy Rather Than Entropy

The cellular environment is a highly crowded environment. The cell is packed with proteins, nucleic acids, osmolytes, salts, and cell organelles. An intriguing question is how the natural environment influences biomolecules in comparison to the dilute solution in a test tube. We used artificial crowding agents (Dextran, poly(ethylene glycol), glucose, potassium chloride, urea) to compare the thermodynamic parameters of the thermal unfolding of the model protein ubiquitin in crowded and dilute solutions. In contrast to the excluded volume theory, which predicts an entropic protein stabilization, an enthalpic stabilization of ubiquitin was observed in the presence of the polymers Dextran and poly(ethylene glycol) as well as the osmolyte glucose and the inorganic salt potassium chloride. The entropic contribution was even destabilizing for these cosolutes indicating that the excluded volume effect cannot explain the experimental results. We attribute the enthalpic stabilization to a water mediated effect of the excluded cosolute.



Die zelluläre Umgebung ist eine dicht gedrängte Umgebung, in der zahlreiche unterschiedliche Komponenten (Proteine, Nukleinsäuren, Osmolyte, Salze, Zellorganellen) auf engem Raum vorhanden sind. In biochemischen Studien werden Proteine vorwiegend in einer verdünnten Lösung untersucht. Hier stellt sich die Frage, wie sich die Eigenschaften von Biomolekülen in einer verdünnten und in einer konzentrierten Lösung unterscheiden. In dieser Studie wurden verschiedene Lösungsmittelzusätze (Dextran, Polyethylenglykol, Glucose, Kaliumchlorid, Urea) eingesetzt und deren Einfluss auf die thermische Entfaltung des Modellproteins Ubiquitin untersucht. Im Vergleich zur verdünnten Lösung konnte in Gegenwart der Polymere Dextran und Polyethylenglykol sowie des Osmolyts Glucose und des Salzes Kaliumchlorid eine enthalpische Stabilisierung beobachtet werden. Der entropische Beitrag war für diese Stoffe destabilisierend. Dies steht im starken Gegensatz zu der „excluded volume“-Theorie, die eine entropische Proteindestabilisierung in konzentrierten Polymerlösungen vorher sagt. Wir führen die enthalpische Stabilisierung auf einen wasservermittelten Prozess zurück, der von dem von der Proteinoberfläche ausgeschlossenen Lösungsmittelzusatz ausgelöst wird.

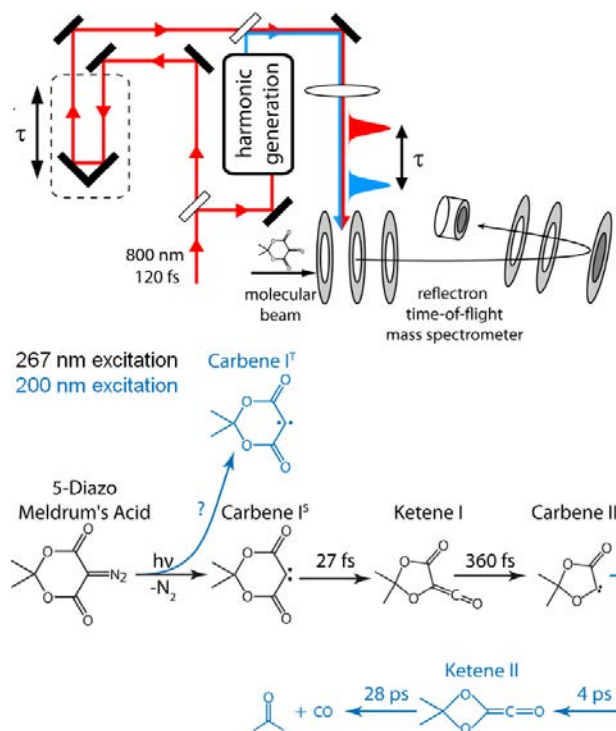
Prof. Dr. Patrick Nuernberger

Physikal. Chemie II; AG Ultraschnelle Photochemie; Ruhr-Uni Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: +49-(0)234-3229946; FAX: +49-(0)234-3214293

email: patrick.nuernberger@rub.de; <http://www.rub.de/ag-nuernberger/>

A. Steinbacher, S. Roeding, T. Brixner, P. Nuernberger, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16** (2014) 7290–7298. Ultrafast photofragment ion spectroscopy of the Wolff rearrangement in 5-diazo Meldrum's acid



The photoinduced Wolff rearrangement of α -diazocarbonyl compounds has been studied for more than a century. Although the reaction is utilized in many applications, e.g. as a photoresist in lithography, the reaction mechanism is still vividly discussed. The scientific debate focuses mainly on the question whether the rearrangement occurs in a concerted or a stepwise manner. In the first case, a ketene is formed while the loss of the diazo group and the rearrangement occur synchronously; in the latter, the reaction proceeds via a carbene intermediate.

This issue has been elucidated by ultra-fast photofragment ion spectroscopy (see setup in the upper panel) on 5-diazo Meldrum's acid. By identification of certain fragment ion signals after 267 nm excitation, it is found that initially Carbene I is formed

which rapidly turns into Ketene I that undergoes further fragmentation, corroborating the theoretically proposed stepwise mechanism of the Wolff rearrangement in the gas phase. Upon deep-UV excitation at 200 nm, additional reaction steps (sketched in blue in the lower panel) are accessible. A second Wolff rearrangement via Carbene II towards Ketene II can occur, and a pathway putatively associated with Carbene I in a triplet configuration becomes possible.

Die photoinduzierte Wolff-Umlagerung von α -Diazocarbonylverbindungen wird seit über einem Jahrhundert untersucht und beispielsweise in der Photolithographie häufig ausgenutzt. Der exakte Reaktionsmechanismus ist allerdings noch nicht endgültig geklärt. Ein zentraler Punkt ist hierbei, ob die Reaktion konzertiert oder sequentiell abläuft. In ersterem Fall wird ein Keten gebildet, indem die Abspaltung der Diazogruppe und die eigentliche Umlagerung gleichzeitig vonstattengehen, wohingegen in letzterem Fall ein Carben-Intermediat auftritt.

Diese Frage wurde mit ultraschneller Photofragment-Ionenspektroskopie (siehe Aufbau im oberen Bild) an 5-Diazo-Meldrumsäure experimentell untersucht. Durch die Identifikation bestimmter Fragment-Ionen nach Anregung mit Laserpulsen bei 267 nm konnte abgeleitet werden, dass zunächst Carben I gebildet wird, welches sich schnell zum Keten I umlagert (unteres Bild). Diese Beobachtung bestätigt den theoretisch vorhergesagten sequentiellen Mechanismus der Wolff-Umlagerung in der Gasphase. Regt man im tiefen UV bei 200 nm an, so ergeben sich zusätzliche Reaktionskanäle (blaue Reaktionen im unteren Bild). In einer zweiten Wolff-Umlagerung wird über Carben II das Keten II gebildet. Zudem deuten die Messungen auf einen Reaktionspfad hin, der die Bildung des Triplets von Carben I umfasst.

Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann

Analytische Chemie – Zentrum für Elektrochemie (CES);

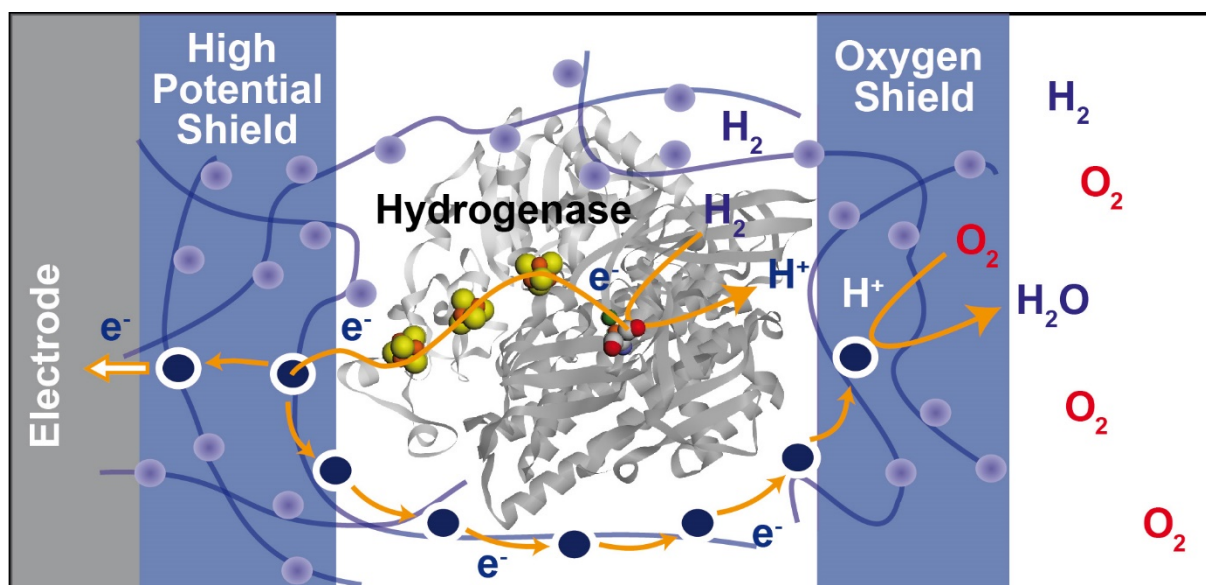
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

N. Plumere, O. Rüdiger, A. Alsheikh Oughli, R. Williams, J. Vivekananthan, S. Pöller, W. Schuhmann, W. Lubitz, *Nature Chem.* **6** (2014) 822-827. A redox hydrogel protects hydrogenase from high potential deactivation and oxygen damage.

Hydrogenases are nature's efficient catalysts for both the generation of energy via oxidation of molecular hydrogen, and the production of hydrogen via the reduction of protons. However, their O₂ sensitivity and deactivation at high potential limit their applications in practical devices, such as fuel cells. Here we show that the integration of an O₂-sensitive hydrogenase into a specifically designed viologen-based redox polymer protects the enzyme from O₂ damage and high potential deactivation. The electron transfer between the polymer-bound viologen moieties controls the potential applied to the active site of the hydrogenase and thus insulates the enzyme from excessive oxidative stress. Under catalytic turnover, electrons provided from the hydrogen oxidation reaction, induce viologen catalyzed O₂ reduction at the polymer surface, thus providing a self-activated protection from O₂. The advantages of this tandem protection are demonstrated using a single compartment biofuel cell based on an O₂ sensitive hydrogenase and H₂/O₂ mixed feed under anode limiting conditions.



Die Evolution von Hydrogenasen war nur möglich unter Nutzung von zugänglichen Elementen. Die effizientesten Hydrogenasen, die Ni und Fe im aktiven Zentrum haben, erreichen die Umsatzrate von Platin. Allerdings werden Hydrogenasen bei hohen Potentialen und durch Sauerstoff deaktiviert. Anstatt nun die Hydrogenase direkt mit der Elektrode zu kontaktieren erfolgt die Immobilisierung in einem Redoxhydrogel, das so designed ist, dass es gleichzeitig Redoxpuffer und Sauerstofffänger ist. Dadurch wirken in dem Hydrogelfilm weder hohe Potentiale noch Sauerstoff auf den Biokatalysator ein. Unter Arbeitsbedingungen, kann die Brennstoffzelle auf Basis des Hydrogenase/Hydrogels über mehrere Wochen chemische Energie aus Wasserstoff in elektrische Energie wandeln. In Abwesenheit des Hydrogels deaktiviert die Hydrogenase innerhalb von Sekunden.

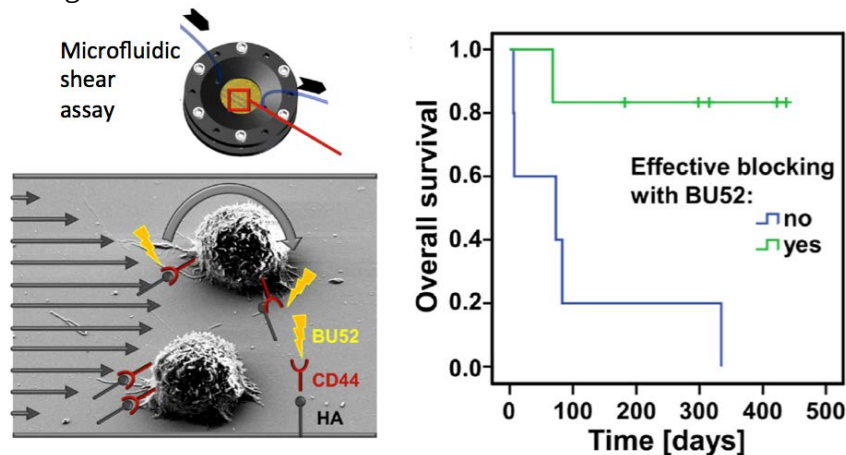
Prof. Dr. Axel Rosenhahn

Analytische Chemie - Biogrenzflächen; Ruhr-Universität Bochum; 44780 Bochum

Tel.: +49-234-3224200; FAX +49-234-3214420

email: axel.rosenhahn@rub.de; www.rub.de/biointerfaces

M. Hanke, I. Hoffmann, C. Christophis, M. Schubert, V. Thanh Hoang, A. Zepeda-Moreno, N. Baran, V. Eckstein, P. Wuchter, A. Rosenhahn, A.D. Ho, *Biomaterials* 35 (2014), 1411. CD44 Mediated Rolling versus Adherence to Hyaluronic Acid: Differences between Healthy Hematopoietic Progenitors and Leukemia Cells



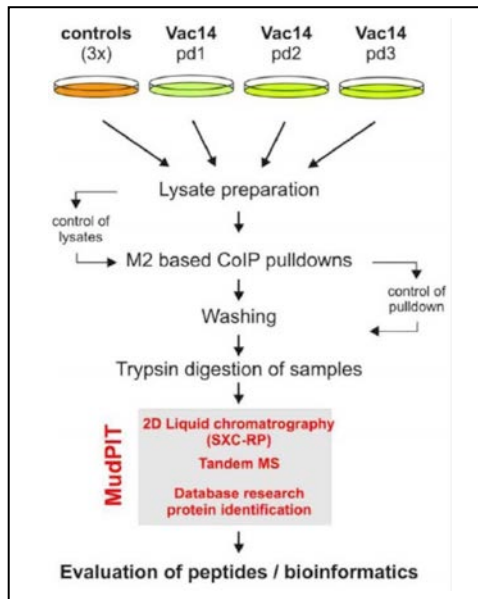
We previously demonstrated that leukemia cell lines expressing CD44 and hematopoietic progenitor cells (HPC) from umbilical cord blood (CB) showed catch-bond induced rolling on synthetic hyaluronic acid (HA)-coated surfaces under physiological shear stress. In the present study, we quantitatively assessed the interaction of HPC derived from CB, mobilized peripheral blood (mPB) and bone marrow (BM) from healthy donors, as well as primary leukemia blasts from PB and BM of patients with acute myeloid leukemia (AML) with HA. We have demonstrated that HPC derived from healthy donors showed relatively homogeneous rolling to HA. In contrast, highly diverse behavioral patterns were found for CD44⁺ leukemia blasts under identical conditions. The monoclonal CD44 antibody (clone BU52) abrogated the shear stress-induced rolling of HPC and leukemia blasts, confirming the significance of CD44 in this context. On the other hand, the immobile adhesion of leukemia blasts to the HA-coated surface was, in some cases, not or incompletely inhibited by BU52. The latter property was associated with non-responsiveness to induction chemotherapy and subsequently poor clinical outcome.

Wie kürzlich gezeigt können CD44 exprimierende, leukämische Zellen und aus Nabelschnurblut (NB) isolierte, hematopoietische Progenitorzellen (HPC) unter physiologischer Scherströmung auf synthetischen, hyaluronbeschichteten (HA) Oberflächen über einen catch-bond Mechanismus rollen. In dieser Arbeit wurden HPC aus NB, mobilisierte Peripherblutzellen und Knochenmarkszellen von gesunden Spenderpatienten mit Zellen von Patienten mit erstdiagnostizierter, myeloischer Leukämie verglichen. Zellen von gesunden Spenderpatienten zeigten ein homogenes Verhalten und typisches Rollen auf HA beschichteten Oberflächen. Im Gegensatz dazu wurde bei leukämischen Blasten ein sehr heterogenes Rollverhalten und immobile Adhäsion beobachtet. Die Rolle von CD44 in der HA Wechselwirkung konnte durch Blockierung mit monoklonalen CD44 Antikörpern (Klon BU52) gezeigt werden. Bei einigen Patienten wurde jedoch beobachtet, dass die immobile Adhäsion nicht oder nur unvollständig durch BU52 verhindert wurde. Genau bei diesen Patienten schlug die Chemotherapie schlecht an und es gab eine signifikant verschlechterte Therapieprognose.

Dr. Dirk Wolters

Anal. Chem. – Biomol. 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>

U. Schulze, B. Vollenbröker, D. Braun, T. Van Le, D. Granado, J. Kremerskothen, B. Fränzel, R. Klosowski, J. Barth, C. Fufezan, D. Wolters, H. Pavenstädt, T. Weide, *Mol Cell Proteomics* **13** (2014) 1397-411. The Vac14-interaction network is linked to regulators of the endo-lysosomal and autophagic pathway



The scaffold protein Vac14 acts in a complex with the lipid kinase PIKfyve and its counteracting phosphatase FIG4, regulating the interconversion of phosphatidylinositol-3-phosphate to phosphatidylinositol-3,5-bisphosphate. Dysfunctional Vac14 mutants, a deficiency of one of the Vac14 complex components, or inhibition of PIKfyve enzymatic activity results in the formation of large vacuole in cells. How these vacuoles are generated and which processes are involved are only poorly understood. Together with our partners from the University Hospital Münster we found out that ectopic overexpression of wild-type Vac14 as well as of the PIKfyve-binding deficient Vac14 L156R mutant causes vacuoles. Vac14-dependent vacuoles and PIKfyve inhibitor-dependent vacuoles resulted in elevated levels of late endosomal, lysosomal, and autophagy-associated proteins. However,

only late endosomal marker proteins were bound to the membranes of these enlarged vacuoles. In order to decipher the linkage between the Vac14 complex and regulators of the endo-lysosomal pathway, a protein affinity approach combined with multidimensional protein identification technology was conducted, and novel molecular links were unraveled. We found and verified the interaction of Rab9 and the Rab7 GAP TBC1D15 with Vac14.

Das Gerüstprotein Vac14 spielt in einem Komplex mit der Lipidkinase PIKfyve und seiner Phosphatase FIG4 eine entscheidende Rolle, indem es Phosphatidylinositol-3-phosphat zu Phosphatidylinositol-3,5-bisphosphat umsetzt. Nicht funktionale Vac14 Mutanten, eine Defizienz von einer Vac14 Komponente oder die Inhibierung der PIKfyve Enzymaktivität führt zur Bildung von übergroßen Vakuolen in der Zelle. Die Prozesse, welche hierfür verantwortlich sind, sind nur wenig verstanden. Zusammen mit unseren Kollaborationspartnern von der Uniklinik Münster haben wir herausgefunden, dass die ektopische Überexpression von Wildtyp Vac14 genauso wie die Vac14 L156R Mutante, welche keine PIKfyve-Bindung eingehen kann, entsprechende Vakuolen ausbilden. Diese Vakuolen wiesen erhöhte Mengen von spät endosomalen, lysosomalen und Autophagie-assoziierten Markerproteinen auf. Allerdings binden nur spät endosomale Markerproteine an der Membran von diesen übergroßen Vakuolen. Mit der MudPIT Technologie gelang es mittels Protein-Protein Interaktionsstudien neue molekulare Ansätze für das Verständnis zu erschließen. So wurden u.a. die Proteine Rab9 und das Rab7 GAP TBC1D15 als Interaktionspartner von Vac14 bestätigt.

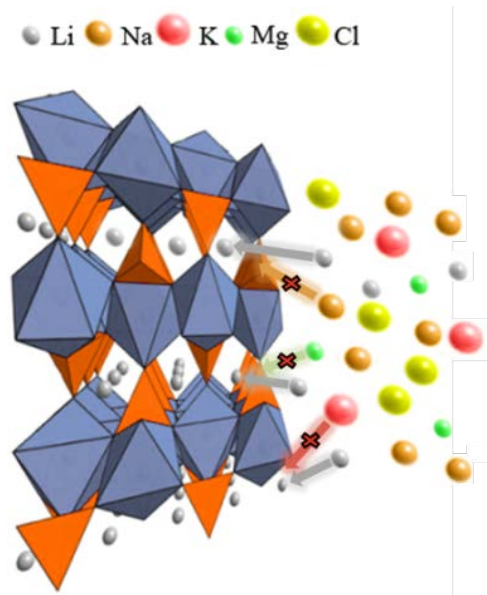
Dr. Fabio La Mantia

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

R. Trócoli, A. Battistel, F. La Mantia, *Chem. Eur. J.* **20** (2014) 9888-9891. Selectivity of lithium recovery process based on LiFePO_4 .



Due to the continuously growing market of fully electric and hybrid vehicles, powered by lithium-ion batteries, and its potential use in thermonuclear fusion, it is estimated that the lithium requirement will reach in the next future 713,000 tons per year. In general lithium can be obtained from several sources as hard minerals, brine lakes, and seawater. However, the production from hard mineral and seawater are not as economically competitive as the brine source. The existing methods for purification of lithium from the brine lakes are expensive, slow and inefficient. Several electrochemical methods based on $\lambda\text{-MnO}_2$ have been proposed as alternative to recover lithium from aqueous solutions but they suffer from high energy consumption or low purity after one stage. In this work we present a low energy consumption process increasing the lithium purity of brine solutions close

to 98% with a single stage galvanostatic cycle.

Prof. Dr. Dominik Marx

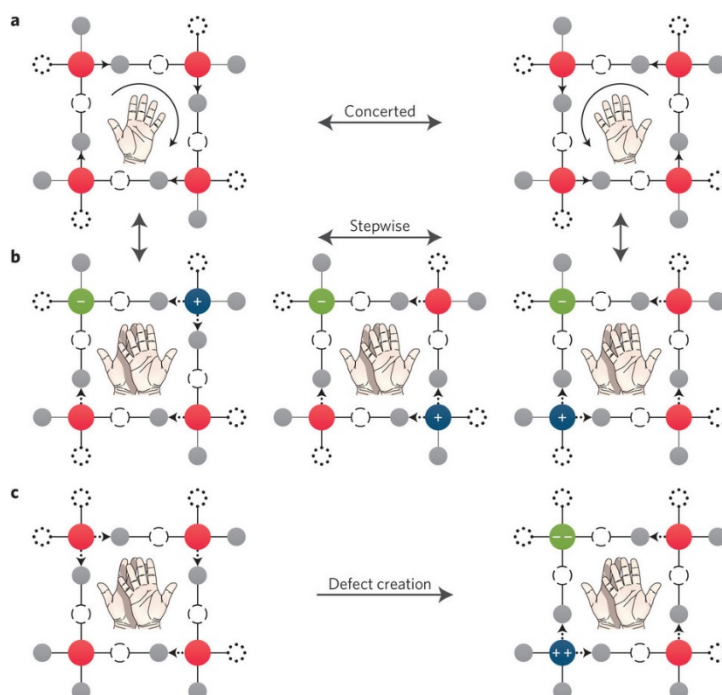
Lehrstuhl für Theoretische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

C. Drechsel-Grau and D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **112**, (2014) 148302-1-5. Quantum Simulation of Collective Proton Tunneling in Hexagonal Ice Crystals. *Angew. Chem. Int. Ed.* **53**, (2014) 10937-10940. Exceptional Isotopic-Substitution Effect: Breakdown of Collective Proton Tunneling in Hexagonal Ice due to Partial Deuteration. *Nature Phys.* **11**, (2015), 216-218. Tunneling in chiral water clusters: Protons in concert.

Der Effekt des Tunnels auf den korrelierten Transfer vieler Protonen in hexagonalem Eis wird mit Hilfe von Quantensimulationen untersucht. Klassische Hüpfprozesse einzelner Protonen entlang ihrer H-Brücken führen zu Ladungsdefekten bei hoher Temperatur. Bei tiefen Temperaturen hingegen tunneln sechs Protonen in ringförmigen Netzwerktopologien konzertiert im Sinne delokalisierten Quasiteilchen, wodurch die Erzeugung hochenergetischer topologischer Defekte vermieden wird. Weiterhin wurde gezeigt, dass bereits eine partielle Deuterierung diesen Effekt zerstört. Schließlich kann ein solches Quasiteilchentunneln neueste STM Ergebnisse erklären, die für chirale zyklische Wassertetramere auf inerten Oberflächen gewonnen wurden.



The effect of proton tunneling on many-body correlated proton transfer in hexagonal ice is investigated by quantum simulation. Classical single-particle hopping along individual hydrogen bonds leads to charge defects at high temperature, whereas six protons in ringlike topologies can move concertedly as a delocalized quasiparticle via collective tunneling at low temperature, thus preventing the creation of high-energy topological defects. Partial deuteration is shown to lead to a breakdown of collective tunneling. Moreover, the quasiparticle tunneling mechanism rationalizes recent experimental STM results involving chiral cyclic water tetramers supported on an inert surface.

PD Dr. Jörg Behler

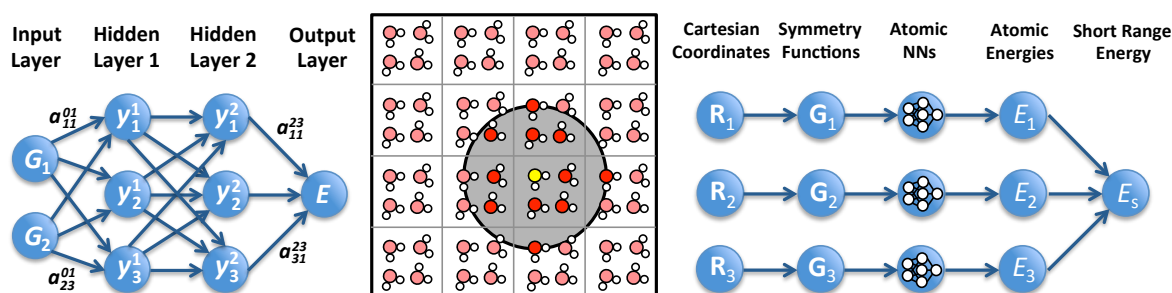
Lehrstuhl für Theoretische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

J. Behler, *J. Phys.: Condens. Matter* **26** (2014) 183001. Representing potential energy surfaces by high-dimensional neural network potentials.

The development of interatomic potentials has seen tremendous progress in recent years. In particular neural network potentials (NNPs) have now become applicable to high-dimensional systems and can be used in large-scale molecular dynamics simulations of thousands of atoms. NNPs are constructed using data from electronic structure calculations. Therefore, NNP-based simulation results are often very close to those gained by a direct application of first-principles methods. The development of NNPs requires substantial computational effort as typically thousands of reference calculations are required. Still, if the problem to be studied involves very large systems or long simulation times this overhead is regained quickly. Due to the ability of NNPs to describe even extremely complex atomic configurations with excellent accuracy irrespective of the nature of the atomic interactions, they represent a general and therefore widely applicable technique, e.g. for addressing problems in materials science, for investigating properties of interfaces, and for studying solvation processes.



Bei der Entwicklung effizienter interatomarer Potentiale sind in den letzten Jahren große Fortschritte gemacht worden. Insbesondere Neuronale Netz Potentiale (NNPs) sind nun auch für hochdimensionale Systeme mit tausenden von Atomen anwendbar und können in Molekulardynamik Simulationen großer Systeme eingesetzt werden. NNPs beruhen auf Elektronenstrukturrechnungen und liefern daher Ergebnisse, die sehr nah an der Qualität von quantenchemischen Verfahren liegen. Trotz der hohen erforderlichen Rechenzeiten bei der Entwicklung von NNPs zahlt sich dieser Aufwand schnell aus, da sie lange Simulationen sehr großer Systeme ermöglichen. Durch ihre Fähigkeit, selbst komplexe Atomanordnungen mit hoher Genauigkeit zu beschreiben, stellen NNPs ein sehr allgemeines und breit einsetzbares Verfahren für Anwendungen in den Materialwissenschaften, bei der Untersuchung von Prozessen an Grenzflächen und bei der Simulation von Solvatationsvorgängen dar.

Prof. Dr. Christof Hättig

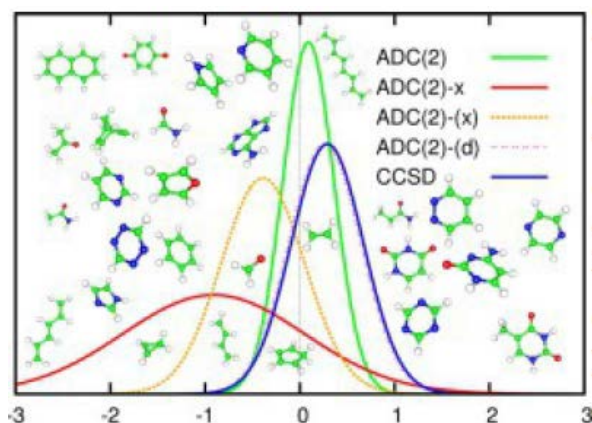
Lehrstuhl für Theoretische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

B. Helmich and C. Hättig, *Comput. Theor. Chem.* **15** (2014) 35-44. A pair natural orbital based implementation of ADC(2)-x: Perspectives and challenges for response methods for singly and doubly excited states in large molecules

At the example of the extended algebraic-diagrammatic construction through second order, ADC(2)-x, we study the performance of a pair natural orbital (PNO) expansion for doubly excited states within a response theory. With the presence of dominantly doubly excited states in the spectra the PNO truncation errors are 2—5 times larger than for strict second-order methods, where such excitations are described in a zeroth-order approximation, but otherwise the rate of convergence with the PNO selection threshold is similar. We analyze the reason for the red shift of excitation energies in ADC(2)-x and trace it back to an unbalanced account of



electron correlation effects in ground and excited states by the term added in the extended method. The balance can be restored by including an additional commutator which accounts for a coupling between double excitations in the ground and the excited state. A perturbative correction which includes both correction terms gives excitation energies close to results from CCSD at, however, lower computational expenses. The PNO expansion opens a route to reduce the steep $O(N^6)$ cost-scaling of the extended ADC(2) and other higherorder response methods without significant degradation of their accuracy. Already our proof-of-principles implementation exhibits a cost-scaling between $O(N^3)$ and $O(N^4)$, which can be further reduced by integral screening and local density fitting to a quadratic cost-scaling.

Am Beispiel der erweiterten algebraisch-diagrammatischen Konstruktion zweiter Ordnung, ADC(2)-x, wird die Performance der *pair-natural-orbital*-Näherung (PNO) für doppelt angeregte Zustände in der Antwort-Theorie untersucht. Unsere Ergebnisse zeigen, dass die Fehler der PNO-Näherung für doppelt angeregte Zustände 2 bis 5 mal höher sind als bei einfach angeregten Zuständen mit der Methode zweiter Ordnung, ADC(2)-s, die doppelt angeregte Zustände nur in nullter Ordnung beschreibt. Die Konvergenz mit dem PNO Schwellenwert ist vergleichbar. Eine Rotverschiebung in ADC(2)-x-Anregungsenergien kann auf eine unbalancierte Behandlung der Elektronenkorrelation im Grund- und angeregten Zustand durch den Zusatzterm in der erweiterten Methode zurückgeführt werden. Die Balance kann wieder hergestellt werden, indem ein weiterer Kommutator berücksichtigt wird, der die Kopplung von Doppelanregungen im Grund- und angeregten Zustand beschreibt. Eine störungstheoretische Korrektur, die beide Terme für doppelt angeregte Zustände enthält, liefert Anregungsenergien mit einer ähnlichen Genauigkeit wie CCSD, jedoch mit geringeren Rechenkosten. Die Verwendung der PNO-Näherung führt zu einer Reduktion der $O(N^6)$ -Skalierung von ADC(2)-x und anderen Methoden höherer Ordnung ohne deren Genauigkeit zu verringern. Eine erste Implementierung zeigt bereits eine Skalierung der Rechenkosten zwischen $O(N^3)$ und $O(N^4)$, die durch Integral-Screening und eine lokale RI-Näherung auf $O(N^2)$ verringert werden kann.

Prof. Dr. Volker Staemmler

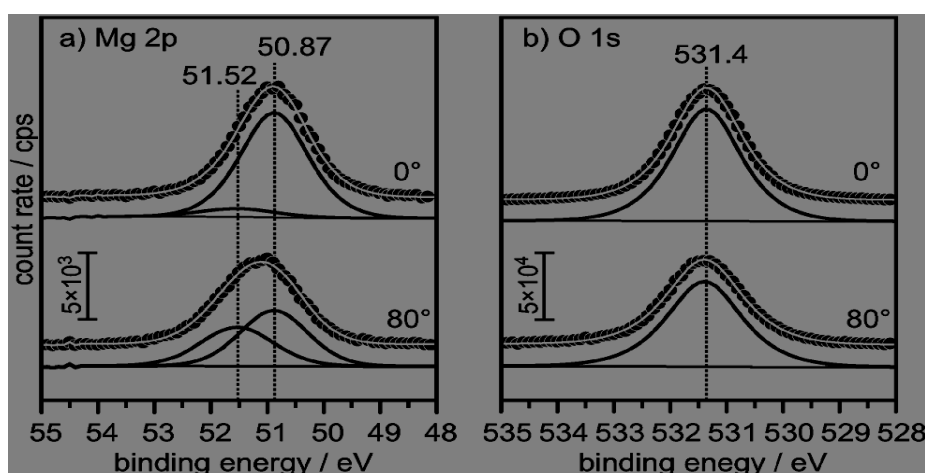
Theor. Chem. - Quantenchemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: staemm@theochem.ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de>

C. J. Nelin, F. Uhl, V. Staemmler, P. S. Bagus, Y. Fujimori, M. Sterrer, H. Kuhlenbeck, H.J.Freund, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16** (2014) 21953-21956. Surface core-level binding energy shifts for MgO(100).

Die Röntgen-Photoelektronen-Spektroskopie (XPS) ermöglicht es, Atome an der Oberfläche eines Festkörpers von gleichen Atomen im Volumen aufgrund der unterschiedlichen Elektronenstruktur und lokalen Umgebung zu unterscheiden. Solche „surface core-level shifts“ (SCLS) sind für viele Metalle gemessen und analysiert worden, bisher aber nicht für ionische Festkörper. In unseren XPS Messungen für die MgO(100) Oberfläche fanden wir, dass der für das Mg2p Niveau gemessene SCLS von +0.7 eV gut mit dem Wert von +0.9 eV eines rein ionischen Madelung-Modells übereinstimmt. Dagegen findet man für O1s einen SCLS von 0.0 eV, während das Madelung Modell -0.9 eV voraussagt. (Die gezeigten Messungen sind oberflächensensitiv bei einem Austrittswinkel von 80°, nicht aber bei 0°.) Quantenchemische *ab initio* Rechnungen für unterschiedliche MgO-Cluster zeigen, dass die 2p Schale des O²⁻ Anions an der (100) Oberfläche vergrößert und auf das Mg²⁺ Kation in der 2. Lage hin polarisiert ist. Dadurch wird das O Atom an der Oberfläche etwas positiver als das im Volumen, und der dadurch entstehende SCLS für das O1s Niveau kompensiert genau den Madelung-Wert von -0.9 eV. Für Mg2p gibt es diesen Effekt nicht.



X-ray photoelectron spectroscopy is an experimental technique to distinguish atoms at solid surfaces from the same atoms in the bulk, since they differ in their local environment and electronic structure. Such “surface core-level shifts” (SCLS) have been measured and analyzed for many metals, but so far not for ionic solids. We found in our XPS measurements for the MgO(100) surface that the SCLS of +0.7 eV measured for the Mg2p core-level agrees quite well with the value of +0.9 eV obtained using a pure ionic Madelung model. For the O1s level, however, the measured SCLS is 0.0 eV while the Madelung model predicts -0.9 eV. (The plots show measurements which are surface sensitive for a takeoff angle of 80°, but not for 0°.) Quantum chemical *ab initio* calculations for various MgO clusters show that the 2p shell of the O²⁻ anion is enlarged at the (100) surface and polarized towards the Mg²⁺ cation in the 2nd layer. This makes the surface O more positive than the bulk O and leads to a SCLS for O1s that cancels exactly the Madelung value. This effect does not exist for Mg2p.

Prof. Dr. 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>

B. Elsler, D. Schollmeyer, K. M. Dyballa, R. Franke, S. R. Waldvogel, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **53**, (2014), 2949-2953. Metal- and Reagent-Free Highly Selective Anodic Cross-Coupling Reaction of Phenols



Die direkte Kreuzkupplung von Phenolen ist eine herausfordernde chemische Umsetzung, da konkurrierende Homokupplungen stark bevorzugte Nebenreaktionen darstellen. Elektrochemische Methoden ermöglichen die Vermeidung von Oxidationsmitteln oder Metallkatalysatoren und sind daher äußerst attraktiv. Der Einsatz von Lösungsmitteln mit starker Neigung zur Wasserstoffbrückenbildung, wie Methanol in Kombination mit Ameisensäure oder 1,1,1,3,3,3-Hexafluor-2-propanol ermöglicht mittels Elektrolyse in ungeteilten Zellen die selektive Synthese von unsymmetrischen 2,2'-Biphenolen. Diese milde Methode toleriert eine Vielzahl funktioneller Gruppen, darunter auch tert-Butylgruppen, die in anderen stark elektrophilen Umgebungen nicht stabil sind, jedoch wichtige Strukturelemente für katalytische Anwendungen darstellen.

The direct oxidative cross-coupling of phenols is a very challenging transformation, as homocoupling is usually strongly preferred. Electrochemical methods circumvent the use of oxidizing reagents or metal catalysts and are therefore highly attractive. Employing electrolytes with a high capacity for hydrogen bonding, such as methanol with formic acid or 1,1,1,3,3,3-hexafluoro-2-propanol, a direct electrolysis in an undivided cell provides mixed 2,2'-biphenols with high selectivity. This mild method tolerates a variety of moieties, for example, tert-butyl groups, which are not compatible with other strong electrophilic media but vital for later catalytic applications of the formed products.

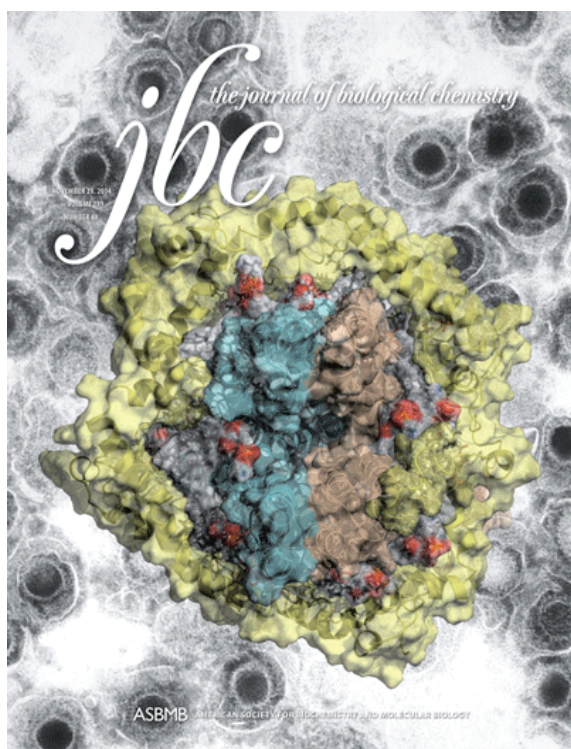
Prof. Dr. Lars Schäfer

Theoret. Chem. – Molecular Simulation; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3221582; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: lars.schaefer@rub.de; <http://www.molecular-simulation.org>

S. Eggensperger, O. Fiset, D. Parcej, L. Schäfer, R. Tampé, *J. Biol. Chem.* **289** (2014) 33098-33108. An annular lipid belt is essential for allosteric coupling and viral inhibition of the antigen translocation complex TAP.



The transporter associated with antigen processing (TAP) constitutes a focal element in the adaptive immune response against infected or malignantly transformed cells. TAP shuttles peptides from proteasomal degradation into the endoplasmic reticulum (ER) lumen for loading of major histocompatibility complex (MHC) class I molecules. MHC-I molecules ultimately present the peptide antigens on the cell surface as markers for T-cell recognition. Malign antigens, e.g. from degradation of viral proteins or from proteins that carry cancerous mutations, are recognized and immune response is triggered. In this work, the heterodimeric TAP complex was reconstituted in lipid nanodiscs. We demonstrate that a single heterodimeric TAP complex is active in specific peptide binding, which is tightly coupled to the ATP hydrolysis process that provides the driving force for antigen transport across the ER membrane. All-atom molecular dynamics (MD) simulations

reveal that only 22 lipids in the nanodisc, as observed experimentally, are sufficient to form an annular belt surrounding the TAP complex. This lipid belt is essential for high-affinity inhibition by the herpesviral immune evasin ICP47. In conclusion, MD simulations demonstrate how computational techniques can probe the interactions between the different components (proteins, lipids, solvent molecules) that govern the structure and dynamics – and hence the function – of complex membrane protein systems.

Prof. Dr. Martin Muhler

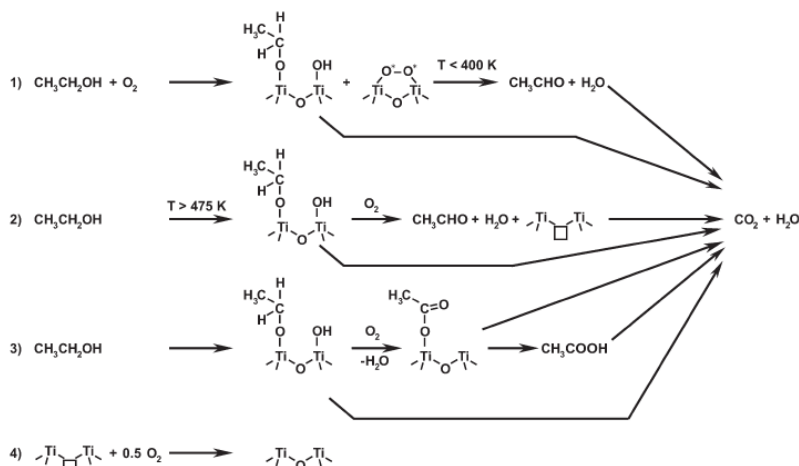
Lehrstuhl für Technische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226745; FAX: ++49-(0)234-3214115

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

M.C. Holz, K. Tölle, M. Muhler, *Catal. Sci. Technol.* **4** (2014) 3495-3504. Gas-phase oxidation of ethanol over Au/TiO₂ catalysts to probe metal-support interactions

In order to investigate the influence on conversion and yield of metal and the role of metal-support interactions a simple test reaction was used. Ethanol was oxidized with pure oxygen over titania and gold nanoparticles supported on titania. The influence of the temperature was also investigated. For this temperature-programmed-desorption and diffuse reflectance infrared spectroscopy were used. The experiments were performed in fixed-bed reactors under continuous flow conditions. Titania dioxide alone was active for selective oxidation and also to a minor extent for the total oxidation to carbon dioxide and water above 500 K. With the gold nanoparticles the temperature for the selective oxidation to acetaldehyde and water was below 400 K. In both processes oxygen is needed to activate the oxidation of ethanol, although Au/TiO₂ catalysts show good bifunctional properties for the oxidation. By IR-spectroscopy ethoxy species were detected which were identified as reactive intermediates in ethanol conversion. Strongly bound acetates and acetic acid were found to reversibly poison the catalyst for the low-temperature oxidation route but not for the high temperature route.



Scheme: Proposed reaction scheme of the ethanol oxidation over Au/TiO₂

Um den Einfluss auf den Umsatz und die Ausbeute von Metall und die Rolle von Metallunterstützten Interaktionen zu untersuchen wurde eine einfache Testreaktion verwendet. Ethanol wurde mit reinem Sauerstoff über Titanium- und Goldnanopartikeln geträgert auf Titanium oxidiert. Auch der Einfluss der Temperatur wurde untersucht. Dafür wurde die Temperatur-Programmierte-Desorption und DRIFT benutzt. Die Experimente wurden in Festbett-Reaktoren unter konstantem Gasstrom durchgeführt. Titandioxid alleine war aktiv für selektive Oxidation und zu einem kleinen Anteil für die totale Oxidation zu Carbondioxid und Wasser über 500 K. Mit den Goldnanopartikeln war die Temperatur für die selektive Oxidation zu Acetaldehyd und Wasser unter 400 K. In beiden Prozessen wird Sauerstoff für die Aktivierung der Oxidierung von Ethanol benötigt, obwohl Au/TiO₂ Katalysatoren gute bifunktionale Eigenschaften für die Oxidierung zeigen. Durch IR-Spektroskopie konnten Ethoxy-Spezies entdeckt werden, welche als reaktive Intermediate der Ethanol Umsetzung identifiziert werden konnten. Stark gebundene Acetate und Essigsäure konnten als reversibles Katalysatorgift für die Tieftemperaturroute ausgemacht werden, nicht jedoch für die Hochtemperaturroute.

Prof. Dr. Wolfgang Grünert

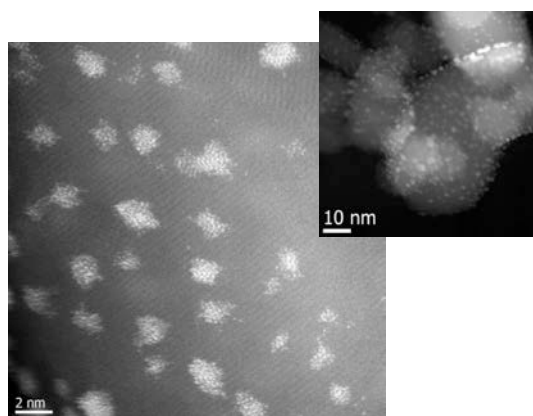
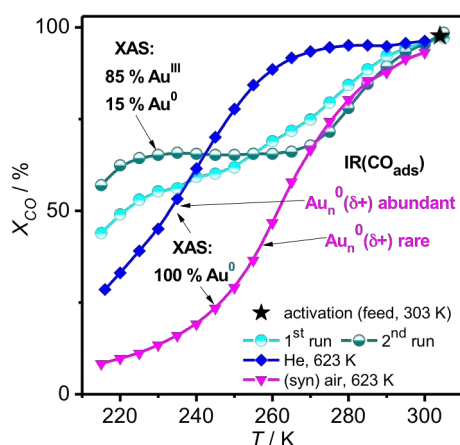
Technische Chemie – Struktur/Aktivität heterogener Katalysatoren

Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

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

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

W. Grünert, D. Großmann, H. Noei, M. M. Pohl, I. Sinev, A. De Toni, Yuemin Wang, M. Muhler, *Angewandte Chemie Int. Ed.* **53** (2014), 3245-3249. Low-temperature CO Oxidation with TiO_2 -supported Au^{3+} ions, sowie *Chemie-Ing-Techn.* **86** (2014) 1883-1889. How different characterization techniques elucidate the nature of the gold species in a polycrystalline Au/ TiO_2 catalyst



In literature, the enormous activity of supported Au in CO oxidation, which allows for high reaction rates far below 0°C , is generally ascribed to Au nanoparticles. We show that the reaction can be catalyzed at comparable rates by TiO_2 -supported Au^{III} . Formation of CO_2 by reaction of adsorbed CO with gas-phase O_2 was demonstrated for a surface containing exclusively Au^{III} (XAFS) by IR spectroscopy at 90 K. In flow experiments, high conversions were obtained over a catalyst with 85 % of Au^{III} (Figure). Reduction of the gold by thermal inert gas treatment completely changed the conversion-temperature characteristics, which demonstrates transition of the catalytic function to another site (from Au^{III} to Au^0). After reduction of gold, activity correlates with the abundance of positively charged Au clusters ($\text{Au}_n^0(\delta^+)$) identified by IR spectroscopy. Comparison with HAADF-STEM images suggests that these may be identified with single Au atoms or oligomeric clusters stabilized by support defects.

In der Literatur wird die enorme CO-Oxidationsaktivität von Gold-Trägerkatalysatoren, die hohe Reaktionsgeschwindigkeiten weit unter 0°C ermöglicht, generell Au-Nanopartikeln zugeschrieben. Wir zeigen, dass die Reaktion mit vergleichbaren Geschwindigkeiten durch $\text{Au}^{\text{III}}/\text{TiO}_2$ katalysiert werden kann. Die Bildung von CO_2 aus adsorbiertem CO und Gasphasensauerstoff konnte bei einer (lt. XAFS) ausschließlich Au^{III} enthaltenden Oberfläche durch IR-Spektroskopie schon bei 90 K gezeigt werden. Im Durchflussregime wurden hohe Umsätze mit einem Katalysator erzielt, der Au zu 85 % als Au^{III} enthielt (Abbildung). Reduktion des Goldes durch thermische Inertgasbehandlung änderte den Charakter der Umsatz-Temperatur-Kurve vollständig. Dies zeigt, dass das Katalysegeschehen auf ein anderes Zentrum übergegangen war: von Au^{III} auf Au^0 . Im Fall des metallischen Goldes korreliert die Aktivität mit der Häufigkeit positiv geladener Au-Cluster ($\text{Au}_n^0(\delta^+)$), die durch IR-Spektroskopie nachweisbar sind. Der Vergleich mit HAADF-STEM-Bildern legt nahe, dass es sich dabei um einzelne Goldatome oder oligomere Cluster handelt, die durch Trägerdefekte stabilisiert sind.

Dr. Yuemin Wang

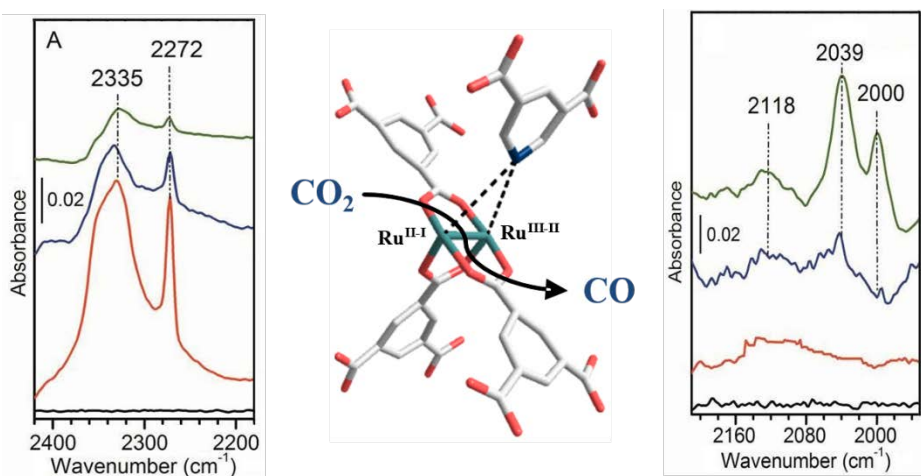
Tech. Chem. / Phys. Chem. - Oberflächenchemie; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224217; FAX: ++49-(0)234-3214182

email: wang@pc.ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ag-wang>

O. Kozachuk, Ig. Luz, F. X. Llabrés i Xamena, H. Noei, M. Kauer, H. B. Albada, E. D. Bloch, B. Marler, Y. Wang, M. Muhler, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 7058-7062. Multifunctional, defect-engineered metal–organic frameworks with ruthenium centers: sorption and catalytic properties.

A mixed-linker solid-solution approach was employed to modify the metal sites and introduce structural defects into the mixed-valence $\text{Ru}^{\text{II/III}}$ structural analogue of the well-known MOF family $[\text{M}_3^{\text{II,II}}(\text{btc})_2]$ ($\text{M}=\text{Cu}, \text{Mo}, \text{Cr}, \text{Ni}, \text{Zn}$), with partly missing carboxylate ligators at the Ru_2 paddle-wheels. Incorporation of pyridine-3,5 dicarboxylate (pydc^{2-}), which is the same size as btc^{3-} but carries lower charge, as a second, defective linker has led to the mixed-linker isorecticular derivatives of Ru-MOF, which display characteristics unlike those of the defect-free framework. Along with the creation of additional coordinatively unsaturated sites, the incorporation of pydc^{2-} induces the partial reduction of ruthenium. Accordingly, the modified Ru sites are responsible for the activity of the “defective” variants in the dissociative chemisorption of CO_2 , the enhanced performance in CO sorption, the formation of hydride species, and the catalytic hydrogenation of olefins.



Das Konzept der „festen Lösungen mit gemischten Linkern“ (mixed-linker solid solution concept) ist angewendet worden, um die Metallzentren des gemischtvalenten $\text{Ru}^{\text{II/III}}$ -Analogons der bekannten Familie der $[\text{M}_3^{\text{II,II}}(\text{btc})_2]$ -MOFs ($\text{M}=\text{Cu}, \text{Mo}, \text{Cr}, \text{Ni}$ oder Zn) zu modellieren und strukturelle Defekte in das Gerüst mit teilweise fehlenden Carboxylatliganden an den Ru_2 -„Schaufelradeinheiten“ einzubringen. Pyridin-3,5-dicarboxylat (pydc^{2-}) als zweiter, Defekt-bildender Linker von ähnlicher Größe wie btc^{3-} , aber geringerer Ladung führt zu einem porösen Derivat von Ru-MOF mit Eigenschaften, die sich von denen des Defekt-freien MOF unterscheiden. So bewirkt das Einbringen von pydc^{2-} außer der Bildung von zusätzlichen koordinativ ungesättigten Metallzentren auch eine partielle Reduktion des Rutheniums. Die modifizierten Ru-Zentren sind für die Aktivität der „defekten“ Varianten hinsichtlich dissoziativer Chemisorption von CO_2 , erhöhter CO-Sorption, Bildung von Ru-H-Spezies und katalytischer Hydrierung von Olefinen verantwortlich.

Dr. Jennifer Strunk

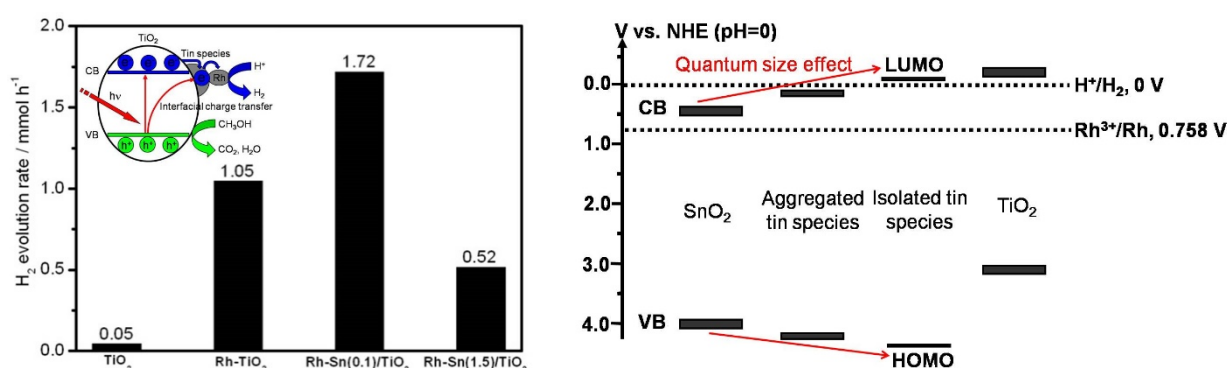
Max-Planck-Institute for Chemical Energy Conversion, 45470 Mülheim a.d. Ruhr

Tel.: +49-(0)203-379-8235, <http://www.cec.mpg.de>

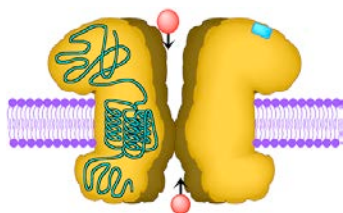
Email: jennifer.strunk@cec.mpg.de / jennifer.strunk@rub.de

S. Chu, A.E. Becerikli, B. Kortewille, F.E. Oropeza, J. Strunk, *Int. J. Hydrogen Energy* **39** (2014) 18784-18792. Tin-grafted TiO_2 with enhanced activity for photocatalytic hydrogen generation from aqueous methanol solutions.

Charge transfer and separation play a key role in determining solar energy conversion performance of semiconductor-based photocatalysts. To enhance the separation and transfer of photogenerated charge carriers, one effective strategy is to modify the photocatalyst with a suitable noble metal (e.g. Pt, Rh, Au) as cocatalyst. However, the activity is still far from practical applications, and charge carrier transfer pathways at the semiconductor–noble metal interface are not yet sufficiently well understood to allow targeted improvement. In this work, we show an interesting example of isolated tin species (0.1 nm^{-2}) which can act as efficient electron mediators to improve the interfacial transfer of photogenerated charge carriers between TiO_2 and Rh. This results in enhanced photocatalytic H_2 evolution activity from aqueous methanol solutions. In contrast, aggregated tin species (1.5 nm^{-2}) do not enable this electron transfer pathway. The lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) energy level of tin species should thus locate at an appropriate potential between the minimum of the conduction band (CB) of TiO_2 and the reduction potential of protons to allow for H_2 evolution to occur. Our study highlights the concept of electron transfer cascades for the design of highly efficient ternary photocatalysts.



Ladungstransfer und -trennung spielen eine wichtige Rolle in der Effizienz von halbleiterbasierten Photokatalysatoren für die Umwandlung von Sonnenenergie. Eine effektive Strategie zur Verbesserung von Trennung und Transfer der durch Photoanregung erzeugten Ladungsträger ist die Modifizierung des Photokatalysators mit einem geeigneten Edelmetall (z.B. Pt, Rh, Au) als Kokatalysator. Die Aktivität ist jedoch noch zu gering für praktische Anwendungen, und die Ladungstransferpfade an der Halbleiter-Edelmetall-Grenzfläche wurden noch nicht hinreichend genug verstanden, um eine gezielte Verbesserung zu ermöglichen. In der vorliegenden Arbeit zeigen wir ein interessantes Beispiel isolierter Zinnspezies (0.1 nm^{-2}) auf, die als Elektronenüberträger fungieren und so den Ladungstransfer über die Grenzfläche zwischen TiO_2 und Rh beschleunigen. Dies steigert die Aktivität in der photokatalytischen Wasserstoffentwicklung aus wässriger Methanollösung. Agglomerierte Zinnspezies (1.5 nm^{-2}) ermöglichen diesen Elektronentransferpfad nicht. Das Energieniveau des tiefsten unbesetzten Molekülorbitals der isolierten Zinnspezies sollte also genau zwischen dem Leitungsbandminimum des TiO_2 und dem Reduktionspotential der Protonen liegen, um die Wasserstoffentwicklung zu ermöglichen. Unsere Studie zeigt zudem das Konzept auf, Elektronentransferkaskaden für die Entwicklung hochaktiver Photokatalysatoren zu nutzen.



Prof. Dr. Michael Hollmann

Biochemie I – Rezeptorbiochemie

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-322-4225; FAX: ++49-(0)234-321-4244

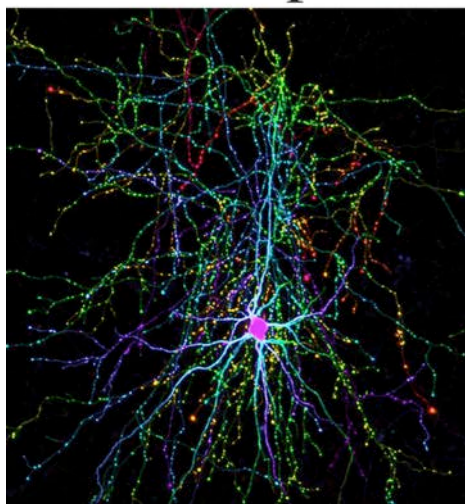
Email: michael.hollmann@rub.de

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

M.I.K. Hamad, A. Jack, O. Klatt, M. Lorkowski, T. Strasdeit, S. Kott, C. Sager, M. Hollmann, P. Wahle, *Development* **141**(8) (2014) 1737-1748, **cover**. Type-I TARPs promote dendritic growth of early postnatal neocortical pyramidal cells in organotypic cultures.

Glutamate receptors of the AMPA (α -amino-3-hydroxy-5-methyl-4-isoxazole propionate) subtype have been shown to be involved in the establishment of the adult branching pattern

Development



Basket cell from organotypic culture of rat cortex. Typically, this type of interneuron has a few tapering dendrites (pseudocoloured light blue to purple) and dense axonal arborization (green, yellow, red) within and beyond its dendritic field. Type I TARPs promote dendritogenesis of immature pyramidal neurons in such cultures.

and spine architecture of dendritic trees of neocortical neurons. TARPs (transmembrane AMPA receptor regulatory proteins) are accessory proteins of AMPA receptors that modulate receptor transport as well as the biophysical properties of AMPA receptors. This prompted us to study whether gene gun-mediated TARP overexpression in organotypic cultures can be used to indirectly modulate the dendritic architecture of neocortical neurons, via modulation of AMPARs. Indeed, we could show that in early development (5-10 days *in vitro*) the type I TARP $\gamma 8$ promotes dendritic growth, while later in development (10-15 days *in vitro*) the three type I TARPs $\gamma 2$, $\gamma 3$, and $\gamma 8$ serve the same purpose. Interestingly, the fourth type I TARP, $\gamma 4$, had the opposite effect and reduced dendritic growth. The effect was cell-type specific (only pyramidal neurons were affected), restricted to apical dendrites, and could not be mimicked by type II TARPs such as $\gamma 5$, $\gamma 6$, and $\gamma 7$.

Glutamatrezeptoren des AMPA- (α -Amino-3-hydroxy-5-methyl-4-isoxazole-Propionsäure) Subtyps sind in die Architektur des Dendritenbaums und der Dornfortsätze neokortikaler Neurone involviert. TARPs (transmembrane, AMPA-Rezeptor regulierende Proteine sind akzessorische Proteine,

die spezifisch bei AMPA-Rezeptoren deren Transport und biophysikalische Eigenschaften modulieren. Dieser Umstand hat uns dazu veranlasst, zu untersuchen, ob durch Überexpression von TARPs indirekt via AMPA-Rezeptormodulation die dendritische Architektur neokortikaler Neurone beeinflusst werden kann. In der Tat konnten wir zeigen, dass in der frühen Entwicklung (5-10 Tage *in vitro*-Kultur) das Typ-I-TARP $\gamma 8$ ausgeprägtes Dendritenbaumwachstum hervorruft, während später in der Entwicklung (10-15 Tage *in vitro*) drei von vier Typ I-TARPs, $\gamma 2$, $\gamma 3$ und $\gamma 8$ Dendritenwachstum bewirken. Das vierte Typ I-TARP, $\gamma 4$, hat dagegen den umgekehrten Effekt und unterdrückt Dendritenwachstum. Der beobachtete Effekt war darüber hinaus zelltypspezifisch (er wurde nur bei Pyramidenneuronen beobachtet, nicht aber bei Interneuronen) und auf die Apikaldendriten beschränkt. Basaldendriten wurden nicht modifiziert. Die Typ II-TARPs $\gamma 5$, $\gamma 6$ und $\gamma 7$ waren nicht in der Lage, den Effekt der Typ I-TARPs zu emulieren.

Prof. Dr. Rolf Heumann

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

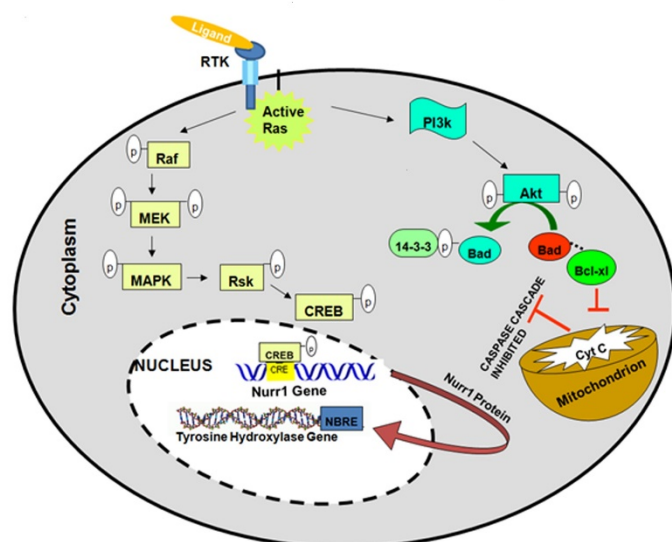
Tel.: ++49-(0)234-3224230; FAX: ++49-(0)234-3214105

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



Designed by
Chr. Klugstedt

R. Heumann, R. Moratalla, M. T. Herrero, K. Chakrabarty, R. Drucker-Colín, J.R., Garcia-Montes, N. Simola, and M. Morelli, *J Neurochem* **130** (2014) 472-89. Dyskinesia in Parkinson's disease: mechanisms and current non-pharmacological interventions.



Dopamine replacement therapy in Parkinson's disease is associated with several unwanted effects, of which dyskinesia is the most disabling. The development of new therapeutic interventions to reduce the impact of dyskinesia in Parkinson's disease is therefore a priority need. The role of dopamine receptors and their associated signaling mechanisms including dopamine-cAMP-regulated neuronal phosphoprotein, extracellular signal-regulated kinase, mammalian target of rapamycin, mitogen and stress-activated kinase-1 and Histone H3

are summarized, along with an evaluation of the role of cannabinoid and nicotinic acetylcholine receptors. The role of synaptic plasticity and animal behavioral results on dyskinesia are also evaluated. This review aims at summarizing the key molecular mechanisms underlying dyskinesia and the most recent therapeutic advances to treat Parkinson's disease with emphasis on non-pharmacological interventions such as physical activity, deep brain stimulation (DBS), transcranial magnetic field stimulation (TMS) and cell replacement therapy. These new interventions are discussed from both the experimental and clinical point of view, describing their current strength and limitations.

Die bei Morbus Parkinson bisher angewendete Dopaminersatztherapie ist mit unerwünschten Nebenwirkungen verbunden, wobei die Dyskinesie zu gravierendsten Beschwerden führt. Die Entwicklung von neuen therapeutischen Methoden zur Eingrenzung der Dyskinesie ist deshalb von oberster Priorität. Die Rolle von Dopaminrezeptoren und deren Signaltransduktionsmechanismen einschließlich der durch Dopamin-cAMP regulierten Phosphorylierungskaskade, der *mitogen activated protein kinase* (MAPkinase), des *mammalian target of rapamycin* (mTOR) Signalweges und der Stress aktivierten Kinase-1 sowie Histon H3 werden unter Einbeziehung der Rolle von Cannabinoid- und nikotinischen Acetylcholinrezeptoren diskutiert. Der Einfluss der synaptischen Plastizität und Ergebnisse aus Verhaltensanalysen über Dyskinesie werden ebenfalls berücksichtigt. Zusammengefasst werden in dieser Publikation die neuesten therapeutischen Fortschritte zur nicht-pharmakologischen Behandlung von Morbus Parkinson abgehandelt, wie physische Bewegung, tiefe Hirnstimulation (DBS), transkranielle Magnetstimulation (TMS) und Zellersatztherapie. Diese neuen Therapiemöglichkeiten werden sowohl vom experimentellen als auch vom klinischen Standpunkt aus bewertet und die Stärken und Grenzen jeweils gegeneinander abgegrenzt.

Prof. Dr. Irmgard Dietzel-Meyer

Biochemie II – AG Elektrobiologie neuronaler Zellen

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum;

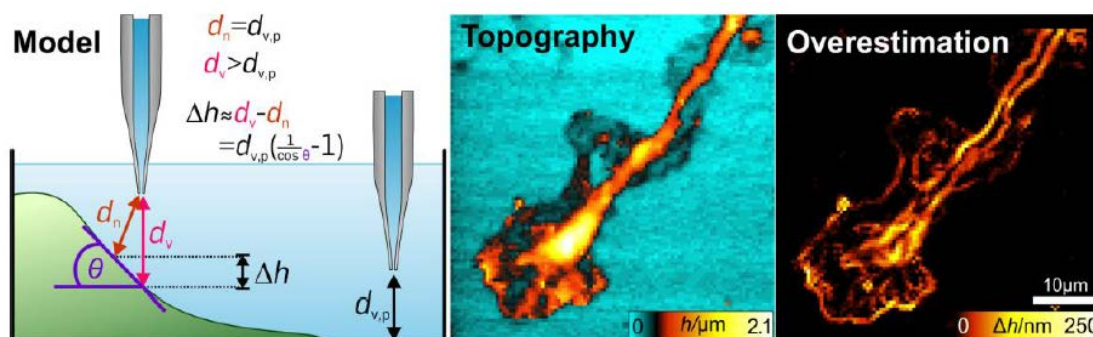
Tel.: ++49-(0)234-3225803; Fax: ++49-(0)234-3214105

email: Irmgard.D.Dietzel-Meyer@rub.de; http://dbs-lin.rub.de/idm/IDM_Home.html

D. Thatenhorst, J. Rheinlaender, T.E. Schäffer, I.D. Dietzel, P. Happel, *Anal. Chem.* **86** (2014), 9838-9845. Effect of Sample Slope on Image Formation in Scanning Ion Conductance Microscopy. doi: 10.1021/ac5024414.

Scanning Ion Conductance Microscopy (SICM) is a scanning probe technique to determine the topography of an insulating sample surface submerged in electrolyte solution. Using this technique living cells can be scanned with minimal impairments. An ionic current through the opening of a glass micropipette is applied during the approach of the scanning tip towards the surface. The current declines hyperbolically when the tip-sample-separation is in the range of the pipette opening diameter, allowing researchers to arrest the approach and store the coordinates when a predefined threshold is reached. By scanning over the sample in a step-wise manner the topography of the surface can be quantified.

In SICM the general assumption is made that equal current drops represent equal tip-sample-distances. Here we demonstrated that this assumption is only strictly valid for perpendicular approaches towards flat sample sections. By considering the normal distance (d_n) instead of the vertical distance (d_v) we developed a correction algorithm to eliminate height overestimations that result from biased height detections at tilted sample sections. This could improve the sample representation especially of scans of living cells since these exhibit large slopes at their outer boundaries.



Die Raster-Ionenleitfähigkeitsmikroskopie (SICM) ist eine Methode zur Quantifizierung der dreidimensionalen Topographie einer isolierenden Probenoberfläche, die von einer Elektrolytlösung umgeben ist. Dies erlaubt, insbesondere die Oberflächentopographie lebender Zellen mit geringer Beeinträchtigung zu untersuchen. Das Verfahren beruht auf dem Prinzip, dass ein Ionenstrom, der durch Anlegen einer konstanten Spannung durch die Öffnung einer Glas-mikropipette in die Badlösung fließt, hyperbolisch mit der Annäherung der Kapillarenöffnung an die Probe abnimmt, wenn der Abstand zur Probe in der Größenordnung des Öffnungsdurchmessers der Kapillare ist. Durch schrittweises Abtasten wird die Oberfläche der Probe quantifiziert.

Wir konnten zeigen, dass die Annahme, dass ein identischer Stromabfall einen identischen Spitzen-Proben-Abstand repräsentiert, nur dann zutrifft, wenn die Messkapillare senkrecht an einen flachen Probenabschnitt angenähert wird. Durch Verwendung des Normalenabstands (d_n) anstelle des vertikalen Abstands (d_v) entwickelten wir einen iterativen Korrekturalgorithmus, um Fehler der Höhenbestimmung bei schräger Annäherung, die besonders bei lebenden Zellen auftreten, zu eliminieren.

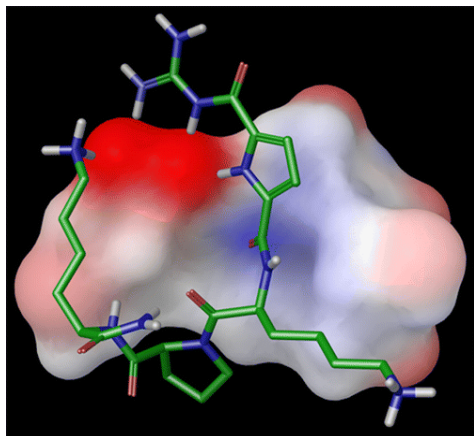
Prof. Dr. Raphael Stoll

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>

P. M. Düppe, Tran Thi Phuong, J. Autzen, M. Schöpel, K. T. Yip, R. Stoll, J. Scherkenbeck, *ACS Chem. Biol.* **9** (2014) 1755–1763. Sequence-selective molecular recognition of the C-terminal CaaX-boxes of Rheb and related Ras-proteins by synthetic receptors



Constitutive activation of Ras-proteins plays an important role in the development of aggressive colorectal carcinomas and several other types of cancer. Despite some progress in recent years in the case of K-Ras4B, until now not a single small molecule inhibitor has been identified that binds efficiently to Rheb and interrupts the protein-protein interactions with mTOR. We describe here a complementary approach that aims at inhibiting membrane insertion of Rheb and related Ras proteins by masking the crucial C-terminal CaaX-box with peptidomimetic receptors identified in combinatorial solid-phase libraries.

Die konstitutive Aktivierung der Ras-Proteine spielt eine wichtige Rolle nicht nur bei der Entstehung aggressiver kolorektaler Karzinome, sondern auch anderer Tumorarten. Bei Ras-Proteinen, wie z. B. K-Ras4B und Rheb, handelt es sich um sogenannte kleine GTPasen. Diese Proteine sind Enzyme, die in zwei Zuständen in der Zelle vorliegen können. In der aktiven Form ist das Molekül GTP gebunden, in der inaktiven Form die energieärmere Form von GTP, GDP genannt. Diese Schalterproteine sind entscheidend dafür, Signale in der Zelle weiterzuleiten.

In den vergangenen Jahren konnten Fortschritte vor allem bei der Suche und Weiterentwicklung pharmazeutisch vielversprechender kleiner Moleküle gemacht werden, die gegen K-Ras4B gerichtet sind. Demgegenüber wurden bisher keine derartigen Kleinmoleküle identifiziert, die effizient an Rheb binden und beispielsweise dessen Wechselwirkung mit dem Protein mTOR inhibieren.

In dieser Arbeit beschreiben wir einen komplementären Ansatz, durch den die physiologisch wichtige Interaktion des Rheb sowie verwandter Ras-Proteine mit biologischen Membranen moduliert werden könnte. Dazu haben wir mittels kombinatorischer Festphasenbibliotheken peptidmimetische Rezeptoren entwickelt, die jeweils die sogenannte carboxyterminale CaaX-Box dieser GTPasen maskieren und somit möglicherweise deren Membraninsertion verhindern.

Prof. Dr. Bernhard Hovemann

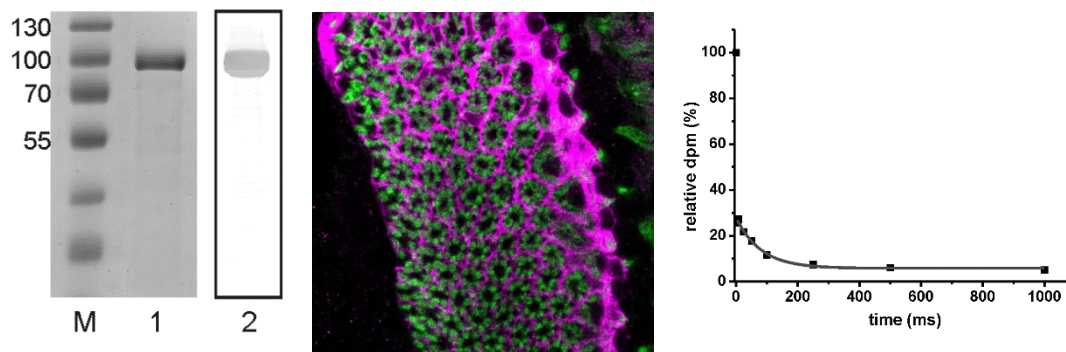
Biochemie II, Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

S. Hartwig, C. Dovengerds, C. Herrmann, B.T. Hovemann, *FEBS Journal* **281** (2014) 5147-5158. *Drosophila* Ebony: a novel type of nonribosomal peptide synthetase related enzyme with unusually fast peptide bond formation kinetics

In visual signal transduction of the *Drosophila* fly the Ebony-protein in photoreceptor axons ensheathing glia (Figure, middle section; Ebony staining in magenta) conjugates β -alanine to histamine to yield β -alanyl-histamine, or carcinine. To prevent local accumulation of histamine that has been removed from the synaptic cleft by transport into glia, carcinine formation has been proposed previously to be a fast process. This proposal, however, did not conform with the determined slow overall reaction kinetics of semi-purified Ebony-protein. Since Ebony belongs to the group of Nonribosomal Peptide Synthetases (NRPSs), it follows a bimodal reaction process, amino acid activation as thio-ester and peptide bond formation. We show here that thio-ester formation follows the slow reaction kinetics of all known NRPSs, but peptide bond formation is an unusual fast process. We purified Ebony from baculovirus infected cells (Figure, left panel). After a slow loading of Ebony with radioactive β -alanine, histamine was added and carcinine formation kinetics determined in a rapid-flow-quench apparatus (Figure, right panel). As proposed carcinine formation is an extremely fast process that is accomplished within milliseconds (Figure, right panel). Taking this result into account β -alanine-activated Ebony could play a key-role in the fast inactivation- and recycling process of histamine neurotransmitter in *Drosophila* visual signal transduction.



In der visuelle Signaltransduktion der *Drosophila* Fliege bildet Ebony in der die Photorezeptor-Axone umhüllenden Glia aus β -Alanin und Histamin Carcinin (Mittleres Feld der Figur, Rote Färbung). Um eine lokale Anhäufung von Histamin ausschließen zu können, sollte dieser Prozess sehr schnell ablaufen. Dem steht aber entgegen, dass die Ebony Reaktion insgesamt langsam abläuft. Ebony als Nichtribosomale Peptidsynthetase führt die Reaktion in zwei Schritten durch, Aminosäure-Aktivierung als Thioester und Knüpfung der Peptid-Bindung. Wir zeigen hier, dass die Thioester-Bildung der langsamen Reaktionskinetik der NRPS Enzyme entspricht, während die Knüpfung der Peptid-Bindung ein ungewöhnlich schneller Prozess ist. Wir haben Ebony aus Baculovirus-infizierten Zelle präpariert und zur Homogenität gereinigt (Linkes Feld der Figur). Nach der langsam verlaufenden Beladung mit radioaktiv markiertem β -Alanin, wurde Histamin zugegeben und die Bildung von Carcinin im Quench-Flow Apparat gemessen. Wie erwartet ist die Carcinin-Bildung ein extrem schneller Vorgang, der in Millisekunden abläuft (Rechtes Feld der Figur). Das Ergebnis zeigt, dass aktiviertes Ebony eine Schlüsselrolle in dem schnellen Inaktivierungs- und Recycling-Prozess des Neurotransmitters Histamin spielen könnte.

Prof. Dr. Katrin Sommer

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

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

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

K. Sommer, J. Lorke, Ch. Mattiesson (Hrsg.) Publizieren in Zeitschriften für Forschung und Unterrichtspraxis – Ein Element der Wissenschaftskommunikation in den Fachdidaktiken und Bildungswissenschaften. Klinkhardt Verlag, Bad Heilbrunn 2014.



Researchers from both didactic and educational research face particular challenges when communicating their findings. They need to participate in the discourses of the scientific community as well as transfer their findings into the practices of the education community.

Researchers can reach both communities via journals. However, scientific articles vary greatly from articles for practicing educators.

- What characteristics do both types of publications have?
- Which “stumbling blocks” do authors have to avoid on their way to a publication for a specific community?
- How can (young) researchers promote their publications in both types of journals?

This book contains contributions from expert scientists and experts in the publishing business that address exactly these questions. This book is written for researchers in didactic and educational research from all subjects and also for teachers at all stages of their professional career.

Die Wissenschaftler aus den Fachdidaktiken und Bildungswissenschaften stehen bei der Kommunikation ihrer wissenschaftlichen Forschungsergebnisse vor einer besonderen Herausforderung – die Diskussion in der scientific community einerseits und der Transfer in das Praxisfeld Schule und Unterricht andererseits.

Beide Zielgruppen können über das Medium Zeitschrift erreicht werden, jedoch unterscheiden sich wissenschaftliche Publikationen deutlich von unterrichtspraktischen Beiträgen.

- Was charakterisiert die beiden Publikationsformate?
- Welche „Stolpersteine“ gibt es für Autoren auf dem Weg zur zielgruppenspezifischen Publikation?
- Wie können (Nachwuchs)Wissenschaftler die Veröffentlichung ihrer Forschungsergebnisse in beiden Formaten zielgerichtet fördern?

Der vorliegende Sammelband lässt Experten aus Wissenschaft sowie pädagogischen Fachverlagen und Zeitschriftenverlagen zu Wort kommen und die aufgeworfenen Fragen diskutieren. Das Buch richtete sich an Fachdidaktiker und Bildungswissenschaftler sowohl aller Fächer als auch unterschiedlicher Qualifikationsstufen sowie interessierte Lehrkräfte.

BIOENERGY

Marie-Curie Initial Training Network „BIOENERGY– Biofuel Cells: From Fundamentals to Applications in Bioelectrochemistry “

Sabine Seisel and Wolfgang Schuhmann

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

Tel.: ++49-(0)234-3225464; FAX: ++49-(0)234-3214420

email: sabine.seisel@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ces/BIOENERGY/>

Can we imagine a miniaturized submarine actively moving through blood vessels and having integrated sensors and tools, or can release a drug stored in a polymer structure exactly at a predefined release site that is otherwise inaccessible?

The ITN “BIOENERGY” coordinated by the Chair of Analytical Chemistry at RUB, accepted this challenge and will develop efficient and stable biofuel cells for powering these devices. During 2014 - the first project year – 11 PhDs and 4 Postdocs have been recruited, working now at 13 European partner institutions. Main emphasis of BIOENERGY is towards microscale, flexible, and if necessary transparent and potentially implantable bioelectric devices. The fellows will develop individual components like electrodes, enzymes or mediator. During two joint measurement campaigns at Ruhr-Universität Bochum the components will be integrated and optimized in order to obtain a biofuel cell ready to use. As a start into the training programme a summer-school was organized in September 2014 at Ile d’Oleron, France. The BIOENERGY fellows and 15 additional PhD students attended lectures covering the whole scientific scope of BIOENERGY. In addition, workshops on team working and presentation skills helped to enable the young scientist to start their career in a international and interdisciplinary research team.



Noch ist es eine Zukunftsvision: medizinische Sensoren, die durch die Blutbahn sausen und nonstop messen, wie hoch beispielsweise der Blutzuckerspiegel ist; oder kleinste Frachtschiffe, die Medikamente an vordefinierte Stellen transportieren und dort ausschütten.

Das ITN „BIOENERGY“, koordiniert vom Lehrstuhl für Analytische Chemie der Ruhr-Universität Bochum, hat diese Herausforderung angenommen und will wandlose, implantierbare Biobrennstoffzellen zur Energieversorgung entwickeln. 11 Doktoranden und 4 Postdocs sind für das Projekt eingestellt worden und arbeiten seit diesem Jahr bei 13 europäischen Partnerinstitutionen aus Forschung und Industrie. Im Projektverlauf bauen die BIOENERGY Fellows zunächst die individuellen Komponenten der Biobrennstoffzelle wie Elektroden, Enzyme und Mediatoren auf. In zwei gemeinsamen Messkampagnen an der RUB fügen sie die Komponenten zusammen, bis am Ende eine funktionstüchtige Biobrennstoffzelle vorliegt. Der Start in das Trainingsprogramm des ITN war eine Sommerschule auf der Ile d’Oleron, Frankreich im September 2014, an der die BIOENERGY Fellows und 15 weitere Doktoranden teilnahmen. Neben Vorlesungen zu allen wissenschaftlichen Teildisziplinen, die für das Projekt relevant sind, gab es Workshops zu „team working“ und „presentation skills“, die den Fellows den Start in einem internationalen und interdisziplinär arbeitenden Forschungsteam ermöglichen.

Veröffentlichungen 2014

Anorganische Chemie 1

- H. Bauke Albada, P. Prochnow, S. Bobersky, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte “Highly active antibacterial ferrocenoylated or ruthenocenoylated Arg-Trp peptides can be discovered by an L-to-D substitution scan“ *Chem. Sci.* **5** (2014) 4453–4459
- Z. Fang, J. P. Dürholt, M. Kauer, W. Zhang, C. Lochenie, B. Jee, H. B. Albada, N. Metzler-Nolte, A. Pöppel, B. Weber, M. Muhler, Y. Wang, R. Schmid, R. A. Fischer “Structural Complexity in MOFs: Simultaneous Modification of Open Metal Sites and Hierarchical Porosity by Systematic Doping with Defective Linkers“ *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 9627–9636
- M. Graf, Y. Gothe, N. Metzler-Nolte, R. Czerwieniec, K. Sünkel “Photophysical and Biological Characterization of new cationic cyclometalated M(III) complexes of rhodium and iridium“ *J. Organomet. Chem.* **765** (2014) 46–52
- S. Baumgart, F. Jansen, W. Bintig, B. Kalbe, C. Herrmann, F. Klumpers, S. D. Köster, P. Scholz, S. Rasche, R. Dooley, N. Metzler-Nolte, M. Spehr, H. Hatt, E. M. Neuhaus “Scaffolding by MUPP1 regulates odorant-mediated signaling in olfactory sensory neurons“ *J. Cell Sci.* **127** (2014) 2518–2527
- I. Kitanovic, S. Can, H. Alborzinia, A. Kitanovic, V. Pierroz, A. Leonidova, A. Pinto, B. Spingler, S. Ferrari, R. Molteni, A. Steffen, N. Metzler-Nolte, S. Wölfl, G. Gasser “A Deadly Organometallic Luminescent Probe: Anticancer Activity of a Re^I Bisquinoline Complex“ *Chem. Eur. J.* **20** (2014) 2496–2507
- M. Wenzel, A. I. Chiriac, A. Otto, D. Zweytick, C. May, C. Schumacher, R. Gust, H. B. Albada, M. Penkova, U. Krämer, R. Erdmann, N. Metzler-Nolte, S. K. Straus, E. Bremer, D. Becher, H. Brötz-Oesterhelt, H.-G. Sahl, J. E. Bandow “Small Cationic Antimicrobial Peptides Delocalize Peripheral Membrane Proteins“ *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111** (2014) E1409–E1418.
- M. Maschke, H. Alborzinia, M. Lieb, S. Wölfl, N. Metzler-Nolte “Structure-Activity Relationship of Trifluoromethyl-containing Metallocenes: Electrochemistry, Lipophilicity, Cytotoxicity, and ROS production“ *ChemMedChem* **9** (2014) 1188–1194
- A. Gutiérrez, M. C. Gimeno, I. Marzo, N. Metzler-Nolte “Synthesis, Characterization, and Cytotoxic Activity of New Au(I) N,S-Heterocyclic Carbenes Derived from Peptides Containing L-Thiazolylalanine“ *Eur. J. Inorg. Chem.* (2014) 2512–2519
- M. Strack, N. Metzler-Nolte, H. B. Albada “Copper-free Cleavage-Sonogashira Conjugation of Silyl-Acetylene Immobilized Peptides“ *Synthesis* **46** (2014) 2293–2296
- A. Kupka, C. Schauerte, K. Merz, *Crystal Growth & Design*, **14** (2014) 2985–2989. Isostructural Crystallization Behavior of Dihydroanthracene and Dihydroacridine
- K. Merz, M. V. Evers, F. Uhl, R. I. Zubatyuk, O. V. Shishkin, *Crystal Growth & Design*, **14** (2014) 3124–3130. Role of CHF₂- and CF₃-Substituents on Molecular Arrangement in the Solid State: Experimental and Theoretical Crystal Structure Analysis of CH₃/CHF₂/CF₃-Substituted Benzene

- E. Patyk, J. Marciniak, H. Tomkowiak, A. Katrusiak, K. Merz, *Acta Crystallographica B*: **70** (2014) 487-491. Isothermal and isochoric crystallization of highly hygroscopic pyridine N-oxide of aqueous solution
- K. Merz, R. Bieda, *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials*, **229** (2014) 635-638. In situ Crystallization of $N(\text{SiMe}_3)_3$ and $\text{As}(\text{SiMe}_3)_3$: Trigonal planar or pyramidal coordination of the central atoms?
- V. Vasylyeva, K. Merz, *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials*, **229** (2014) 603-608. Crystal architecture of the low melting nitrogen heterocycles tetrafluoropyrimidine and trifluorotriazine
- K. Menzel, U.-P. Apfel, N. Wolter, R. Rüger, T. Alpermann, F. Steiniger, D. Gabel, S. Förster, W. Weigand, A. Fahr, *J. Liposome Res.* **2014**, *24*, 59 - 68.
- A. Majumdar, U.-P. Apfel, Y. Jiang, P. Moënné-Loccoz, S. J. Lippard, *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 167 - 181.
- U.-P. Apfel, F. Y. Pietillon, P. Schollhammer, J. Talarmin, W. Weigand, *[FeFe] Hydrogenase Models: an Overview in Bioinspired Catalysis - Metal-Sulfur Complexes*, Edited by W. Weigand, P. Schollhammer, **2014**, Wiley-VCH ISBN:9783527664191.

Anorganische Chemie 2

- C. Rösler, D. Esken, C. Wiktor, H. Kobayashi, T. Yamamoto, S. Matsumura, H. Kitagawa, R. A. Fischer, „Encapsulation of Bimetallic Nanoparticles into a Metal-Organic Framework: Preparation and Microstructure Characterization of Pd/Au@ZIF-8”, *Eur. J. Inorg. Chem.* **32** (2014) 5514-5521.
- C. Wiktor, S. Turner, D. Zacher, R. A. Fischer and G. Van Tendeloo, Imaging of intact MOF-5 nanocrystals by advanced TEM at liquid nitrogen temperature“, *Microporous Mesoporous Mater.* **162** (2012) 131-135.
- M. Molon, C. Gemel, P. Jerabek, L. Trombach, G. Frenking, R. A. Fischer, „Hume-Rothery Phase-Inspired Metal-Rich Molecules: Cluster Expansion of $[\text{Ni}(\text{ZnMe})_6(\text{ZnCp}^*)_2]$ by Face Capping with $\text{Ni}^0(\eta^6\text{-toluene})$ and $\text{Ni}^I(\eta^5\text{-Cp}^*)$ “, *Inorg. Chem.* **53** (2014) 10403-10411.
- D. Zacher, R. Nayuk, R. Schweins, R. A. Fischer, and K. Huber, „Monitoring the Coordination Modulator Shell at MOF Nanocrystals, *Cryst. Growth. Des.* **14** (2014) 4859–4863.
- Z. Sun, X. Huang, F. Liu, X. Yang, C. Rösler, R. A. Fischer, M. Muhler, W. Schuhmann, „Amine-based solvents for exfoliating graphite to graphene outperform the dispersing capacity of N-methyl-pyrrolidone and surfactants“, *Chem. Commun.* **50** (2014) 10382-10385.
- Z. Fang, J. P. Dürholt, M. Kauer, W. Zhang, C. Lochenie, B. Jee, B. Albada, N. Metzler-Nolte, A. Pöppel, B. Weber, M. Muhler, Y. Wang, R. Schmid, R. A. Fischer, „Structural Complexity in Metal–Organic Frameworks: Simultaneous Modification of Open Metal Sites and Hierarchical Porosity by Systematic Doping with Defective Linkers“, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 9627-9636.

- K. Freitag, H. Banh, C. Gemel, R. W. Seidel, S. Kahla, J.-Y. Saillard, R. A. Fischer, "Molecular brass: Cu₄Zn₄, A ligand protected superatom cluster", *Chem. Commun.* **50** (2014) 8681-8684.
- M. Tu, S. Wannapaiboon, R. A. Fischer, "Liquid phase stepwise growth of surface mounted coordination network compounds for exploratory research and development of applications", *Inorg. Chem. Front.* **1** (2014) 442 – 463.
- A. Schneemann, V. Bon, I. Schwedler, I. Senkovska, S. Kaskel, R. A. Fischer, "Flexible Metal-Organic Frameworks", *Chem. Soc. Rev.* **43** (2014) 6062-6098.
- M. Molon, C. Gemel, R. A. Fischer, "Group-13 Carbenoid Ligands at Tungsten: Coordination and C-H Activation", *J. Organomet. Chem.* **751** (2014) 573-578.
- C. Ganesamoorthy, J. Weßing, C. Kroll, R. W. Seidel, C. Gemel, R. A. Fischer, "The Intermetalloid Cluster [(Cp*AlCu)₆H₄], embedding a Cu₆ core inside an octahedral Al₆ shell: Molecular Models of Hume-Rothery Nanophases", *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 7943–7947.
- K. Khaletskaya, S. Turner, M. Tu, S. Wannapaiboon, A. Schneemann, R. Meyer, A. Ludwig, G. Van Tendeloo, R. A. Fischer; "Self-directed localization of ZIF-8 thin film formation by conversion of ZnO nano layers", *Adv. Funct. Mater.* **24** (2014) 4804-4811.
- A. Schneemann, S. Henke, I. Schwedler, R. A. Fischer, „Targeted Manipulation of Metal–Organic Frameworks To Direct Sorption Properties“, *ChemPhysChem* **5** (2014) 823-839.
- O. Kozachuk, I. Luz, F. X. Llabrés i Xamena, H. Noei, M. Kauer, H. B. Albada, E. D. Bloch, B. Marler, Y. Wang, M. Muhler, R. A. Fischer, "Multifunctional, Defect Engineered Ru-MOFs: Sorption nad Catalytic Properties", *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 7058-7062.
- A. Puls, P. Jerabek, W. Kurashige, M. Förster, M. Molon, T. Bollermann, M. Winter, C. Gemel, Y. Negishi, G. Frenking, R. A. Fischer, „A New Synthesis Concept for Multiply Doped Gold Clusters [(M@Au_nM'_m)L_k]^{a+}“, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 4327-4331.
- K. Schütte, H. Meyer, C. Gemel, J. Barthel, R. A. Fischer and C. Janiak, "Synthesis of Cu, Zn and bimetallic Cu/Zn brass alloy nanoparticles from metal amidinate precursors in ionic liquid or propylene carbonate with relevance to methanol synthesis," *Nanoscale* **6** (2014) 5532-5544.
- K. Schütte, A. Doddi, C. Kroll, H. Meyer, C. Wiktor, C. Gemel, G. van Tendeloo, R. A. Fischer, C. Janiak "Colloidal nickel/gallium nanoalloys obtained from organometallic precursors in conventional organic solvents and in ionic liquids: Noble-metal-free alkyne semihydrogenation catalysts, *Nanoscale* **6** (2014) 3116-3126.
- M. Tu, R. A. Fischer, "Heteroepitaxial growth of surface mounted metalorganic framework thin films with hybrid adsorption functionality“, *J. Mater. Chem. A* **2** (2014) 2018-2022.
- S. Wannapaiboon, M. Tu, R. A. Fischer, "Liquid Phase Heteroepitaxial Growth of Moisture Tolerant MOF-5 Isotype Thin Films and Assessing the Sorption Properties by Quartz Crystal Microbalance" , *Adv. Funct. Mater.* **18** (2014) 2696-2705.
- M. Molon, C. Gemel, R. A. Fischer, "Organogallium- and Organozinc-rich Palladium and Platinum Clusters", *Dalton Trans.* **43** (2014) 3114-3120.

- L. H. Wee, N. Janssens, S. P., Sree, Christian Wiktor, E. Gobechiya, **R. A. Fischer**, C. E. A. Kirschhock, J. A. Martens, "Local transformation of ZIF-8 powders and coatings into ZnO nanorods for photocatalytic applications", *Nanoscale*, **6** (2014) 2056-2060.
- N. B. Srinivasan, T. B. Thiede, T. de los Arcos, D. Rogalla, H. W. Becker, A. Devi, R. A. Fischer, "MOCVD of tungsten nitride thin films: Comparison of precursor performance and film characteristics", *Phys. Stat. Solidi A*, **211** (2014) 260-266.
- M. Gebhard, M. Hellwig, H. Parala, K. Xu, M. Winter, A. Devi, Dalton Trans. **43(3)** (2014) 937-940. Indium-tris-guanidinate: a promising class of precursors for water assisted atomic layer deposition of In₂O₃ thin films.
- Kurek, P. Gordon, S. Karle, A. Devi, S. T. Barry, Aust. J. Chem, **67(7)** (2014) 989-996. Recent advances using guanidinate ligands for chemical vapour deposition (CVD) and atomic layer deposition (ALD) applications.
- M. Banerjee, R. W. Seidel, M. Winter, H.-W. Becker, D. Rogalla, A. Devi, Dalton Trans. **43(6)** (2014) 2384-2396. Novel β -ketoiminato complexes of zirconium: synthesis, characterization and evaluation for solution based processing of ZrO₂ thin films.
- M. Kaipio, T. Blanquart, M. Banerjee, K. Xu, J. Niinistö, V. Longo, K. Mizohata, A. Devi, M. Ritala, M. Leskela, Chem. Vap. Deposition, **20(7-9)** (2014) 209-216. Atomic layer deposition of TiO₂ and ZrO₂ thin films using heteroleptic guanidinate precursors.
- K. Xu, V. S. Dang, A. Ney, T. de los Arcos, A. Devi, J. Nanosci. Nanotechnol. **14(7)** (2014) 5095-5102. Investigations on the structural, compositional and functional properties of MOCVD grown Er₂O₃ thin films.
- D. Peeters, G. Carraro, C. Maccato, H. Parala, A. Gasparotto, D. Barreca, C. Sada, K. Kartaschew, M. Havenith, D. Rogalla, A. Devi, Physica Status Solidi A: Applications and Materials Science, **211(2)** (2014) 316-322. Tailoring iron(III) oxide nanomorphology by chemical vapor deposition: Growth and characterization.
- D. Barreca, G. Carraro, D. Peeters, A. Gasparotto, C. Maccato, W. M. M. Kessels, V. Longo, F. Rossi, E. Bontempi, C. Sada, Chem. Vap. Deposition **20(7-9)** (2014) 313-319. A. Devi, Surface decoration of ϵ -Fe₂O₃ nanorods by CuO via a two-step CVD/Sputtering approach.
- V.S. Dang, H. Parala, J. H. Kim, K. Xu, N. B. Srinivasan, E. Edengeiser, M. Havenith, A. Wieck, T. de los Arcos, R. A. Fischer, A. Devi, Physica Status Solidi A: Applications and Materials Science **211(2)** (2014) 416-424. Electrical and optical properties of TiO₂ thin films prepared by plasma-enhanced atomic layer deposition.
- Devi, W. M. M. Kessels, Chem. Vap. Deposition, **20(7-8-9)**, (2014), 186-188. Atomic scale engineered materials.
- V.-S. Dang, M. Banerjee, H. Zhu, N. B. Srinivasan, H. Parala, J. Pfitzing-Micklich, A. D. Wieck, A. Devi, Chem. Vap. Deposition, **20(7-9)** (2014) 320-327. Investigation of optical, electrical, and mechanical Properties of MOCVD-grown ZrO₂ films.
- F. Roozeboom, D. Barreca, A. Devi, H. Parala, M. Ritala, Phys. Status Solidi A, **211(2)** (2014) 249-250. Atomic-scale engineering of multifunctional nano-sized materials and films.
- M. Bledowski, L. Wang, S. Neubert, R. Beranek, *J. Phys. Chem. C* **118** (2014) 18951-18961. Improving the Performance of Hybrid Photoanodes for Water Splitting by Photodeposition of Iridium Oxide Nanoparticles

- M. Banerjee, V.-S. Dang, M. Bledowski, R. Beranek, H.-W. Becker, D. Rogalla, E. Edengeiser, M. Havenith, A. D. Wieck, A. Devi, *Chem. Vap. Deposition* **20** (2014) 224-233. MOCVD of TiO₂ thin films using a heteroleptic titanium complex: Precursor evaluation and investigation of optical, photoelectrochemical and electrical properties
- C. Forlini, J. Schildmann, P. Roser, R. Beranek, J. Vollmann, *Neuroethics* (2014), DOI: 10.1007/s12152-014-9218-z. Knowledge, Experiences and Views of German University Students Toward Neuroenhancement: An Empirical-Ethical Analysis
- S. Neubert, P. Pulisova, C. Wiktor, P. Weide, B. Mei, D. A. Guschin, R.A. Fischer, M. Muhler, R. Beranek, *Catal. Today* **230** (2014) 97-103. Enhanced photocatalytic degradation rates at rutile TiO₂ photocatalysts modified with redox co-catalysts"
- S. Neubert, A. Ramakrishnan, J. Strunk, H. Shi, B. Mei, L. Wang, M. Bledowski, D. A. Guschin, M. Kauer, Y. Wang, M. Muhler, R. Beranek, *ChemPlusChem* **79** (2014) 163-170. Surface-Modified TiO₂ Photocatalysts Prepared by a Photosynthetic Route: Mechanism, Enhancement, and Limits
- S. Neubert, R. Beranek, *GIT Labor-Zeitschrift* **58/3** (2014) 72-75. Chemie unter der Sonne: Neue photoaktive Materialien für Energiekonversion und Umweltschutz

Organische Chemie 1

- D. Nitsch, S. M. Huber, A. Pöthig, A. Narayanan, G. A. Olah, G. K. Surya Prakash, T. Bach, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 2851–2857. Chiral Propargylic Cations as Intermediates in S_N1-Type Reactions: Substitution Pattern, Nuclear Magnetic Resonance Studies, and Origin of the Diastereoselectivity.
- R. Castelli, S. Schindler, S. M. Walter, F. Kniep, H. S. Overkleeft, G. A. Van der Marel, S. M. Huber, J. D. C. Codée, *Chem. Asian J.* **9** (2014) 2095-2098. Activation of Glycosyl Halides by Halogen Bonding.
- S. H. Jungbauer, S. M. Walter, S. Schindler, L. Rout, F. Kniep, S. M. Huber, *Chem. Commun.* **50** (2014) 6281-6284. Activation of a carbonyl compound by halogen bonding.
- S. H. Jungbauer, D. Bulfield, F. Kniep, C. W. Lehmann, E. Herdtweck, S. M. Huber, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 16740-16743. Toward Molecular Recognition: Three-Point Halogen Bonding in the Solid State and in Solution.
- V. Patzke, J. S. McCaskill and G. von Kiedrowski, *Angewandte Chemie-International Edition*, **53** (2014) 4222-4226. DNA with 3'-5'-Disulfide Links—Rapid Chemical Ligation through Isosteric Replacement
- U. Tangen, J. S. McCaskill, *Genetic Programming and Evolvable Machines*, **15** (2014) 343-374. On evolvability and robustness in the matrix-GRT model

Organische Chemie 2

- G. Bucher, W. Sander, *Science* **346** (2014), 544-545. Clarifying the structure of carbonic acid.
- P. Costa, M. Fernandez-Oliva, E. Sanchez-Garcia, W. Sander, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014), 15625-15630. The Highly Reactive Benzhydryl Cation Isolated and Stabilized in Water Ice.
- A. Korte, A. Mardyukiv, W. Sander, *Austr. J. Chem.* **67** (2014), 1324-1329. Pyridyl- and Pyridylperoxy Radicals - A Matrix Isolation Study.
- W. Sander, S. Roy, K. Bravo-Rodriguez, D. Grote, E. Sanchez-Garcia, *Chem. Eur. J.* **20** (2014), 12917-12923. The Benzylperoxyl Radical as a Source of Hydroxyl and Phenyl Radicals.
- R. Crespo-Otero, A. Mardyukov, E. Sanchez-Garcia, W. Sander, M. Barbatti, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16** (2014), 18877-18887. Photo-stability of peptide-bond aggregates: N-methylformamide dimers.
- M. Winkler, W. Sander, *Acc. Chem. Res.* **47** (2014), 31-44. Triradicals
- W. Sander, *Angew. Chem.* **53** (2014), 362-364. Carbonyl Oxides-Rising Stars in Tropospheric Chemistry.
- M. Krupicka, W. Sander, D. Marx, *J. Phys. Chem. Lett.* **5** (2014), 905-909. Mechanical Manipulation of Chemical Reactions: Reactivity Switching of Bergman Cyclizations.
- C. Merten, F. Li, K. Bravo-Rodriguez, E. Sanchez-Garcia, Y. Xu, W. Sander, *Chem-PhysChem* **16** (2014), 5627-5633. Solvent-induced conformational changes in cyclic peptides: a vibrational circular dichroism study.
- M. Ertelt, D. A. Hrovat, W. T. Borden, W. Sander, *Chem. Eur. J.* **20** (2014), 4713-4720. Heavy-Atom Tunneling in the Ring Opening of a Strained Cyclopropene at Very Low Temperatures.
- D. S. N. Parker, B. B. Dangi, R. I. Kaiser, A. Jamal, M. N. Ryazantsev, K. Morokuma, A. Korte, W. Sander, *J. Phys. Chem. A* **118** (2014), 2709-2718. An Experimental and Theoretical Study on the Formation of 2-Methylnaphthalene (C₁₁H₁₀/C₁₁H₃D₇) in the Reactions of the Para-Tolyl (C₇H₇) and Para-Tolyl-d₇ (C₇D₇) with Vinylacetylene (C₄H₄).
- P. Costa, W. Sander, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014), 5122-5125. Hydrogen Bonding Switches the Spin State of Diphenylcarbene from Triplet to Singlet.
- S. Henkel, M. Ertelt, W. Sander, *Chem. Eur. J.* **20** (2014), 7585-7588. Deuterium and Hydrogen Tunneling in the Hydrogenation of 4-Oxocyclohexa-2,5-dienylidene.
- S. V. Chapyshev, E. N. Ushakov, P. Neuhaus, W. Sander, *J. Org. Chem.* **79** (2014), 6047-6053. Matrix Isolation, Zero-Field Splitting Parameters, and Photoreactions of Septet 2,4,6-Trinitrenopyrimidines.
- S. Schoeler M. Wahl, N. I. C. Wurster, A. Puls, C. Haettig, G. Dyker, *Chemical Communications* **50** (2014), 5909-5911. Bidentate cycloimidate palladium complexes with aliphatic and aromatic anagostic bonds.
- C. Merten, C. J. Berger, R. McDonald, Y. Xu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 9940-9943. Evidence of Dihydrogen Bonding of a Chiral Amine-Borane Complex in Solution by VCD Spectroscopy

- C. Merten, J. F. Reuther, J. D. DeSousa, B. M. Novak, *Phys Chem Chem Phys*, **16** (2014) 11456-11460. Identification of the Specific, Shutter-like Conformational Reorientation in a Chiroptical Switching Polycarbodiimide by VCD Spectroscopy
- C. Merten, R. McDonald, Y. Xu, *Inorg. Chem.*, **43** (2014) 3177-3182. Strong solvent-dependent preference of Δ - and Λ -stereoisomers of a tris(diamine) nickel(II) complex revealed by vibrational circular dichroism spectroscopy
- G. He, W. Torres Delgado, D. J. Schatz, C. Merten, A. Mohammadpour, L. Mayr, M. J. Ferguson, R. McDonald, A. Brown, K. Shankar and E. Rivard. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **53** (2014) 4587-4591. Coaxing Solid State Phosphorescence from Tellurophenes

Physikalische Chemie 1

- K. Volgmann, H. Gawronski, Ch. Zaum, G. Rusina, S. Borisova, E. Chulkov, K. Morgenstern, *Nature Communications* **5** (2014), 5089 Local determination of the amount of integration of an atom into a crystal surface
- Jörg Henzl, Konrad Boom, K. Morgenstern, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014), 13341 Using the first steps of hydration for the determination of molecular conformation of a single molecule
- S. Heidorn, A. Sabellek, K. Morgenstern, *Nano Letters*, **14** (2014), 13 Size dependence of the dispersion relation for the interface state between NaCl(100) and Ag(111)
- C. Zaum, J. Meyer, K. Reuter, K. Morgenstern, *Phys. Rev. B* **90** (2014), 165418 Quantitative determination of a nano-object's atom density without atomic resolution
- H. Gawronski, K. Morgenstern, *Phys. Rev. B* **89** (2014), 125420 Physisorption versus chemisorption in inelastic electron tunneling spectroscopy: Mode position, intensity, and spatial distribution
- M. Mehlhorn, S. Schnur, A. Groß, K. Morgenstern, *ChemElectroChem*, **2** (2014), 431 Molecular-Scale Imaging of Water Near Charged Surfaces
- N. Ostler, N. Britzen-Laurent, A. Liebl, E. Naschberger, G. Lochnit, M. Ostler, F. Forster, P. Kunzelmann, S. Ince, V. Supper, G. J. K. Praefcke, D. W. Schubert, H. Stockinger, C. Herrmann, M. Stürzl, *Mol. Cell. Biol.* **34** (2014) 196-209. IFN- γ -induced Guanylate Binding Protein-1 is a novel Actin Cytoskeleton Remodeling Factor
- S. Baumgart, F. Jansen, W. Bintig, B. Kalbe, C. Herrmann, F. Klumpers, S. D. Köster, P. Scholz, S. Rasche, R. Dooley, N. Metzler-Nolte, M. Spehr, H. Hatt, E. M. Neuhaus, *J. Cell Sci.* **127** (2014) 2518-2527. Scaffolding by MUPP1 regulates odorant-mediated signaling in olfactory sensory neurons
- M. S. Taha, K. Nouri, L. G. Milroy, J. M. Moll, C. Herrmann, L. Brunsveld, R. P. Piekorz, M. R. Ahmadian, *PLoS One* **9** (2014) e91465. Subcellular fractionation and localization studies reveal a direct interaction of the fragile X mental retardation protein (FMRP) with nucleolin
- C. Rosnizeck, D. Filchtinski, R. P. Lopes, B. Kieninger, C. Herrmann, H. R. Kalbitzer, M. Spoerner, *Biochemistry* **53** (2014) 3867-3878. Elucidating the Mode of Action of a Typical Ras State 1(T) Inhibitor

- M. Senske, L. Törk, B. Born, M. Havenith, C. Herrmann, S. Ebbinghaus, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 9036-9041. Protein stabilization by macromolecular crowding through enthalpy rather than entropy
- T. Vöpel, C. S. Hengstenberg, T. O. Peulen, Y. Ajaj, C. A. Seidel, C. Herrmann, J. P. Klare, *Biochemistry* **53** (2014) 4590-4600. Triphosphate Induced Dimerization of Human Guanylate Binding Protein 1 Involves Association of the C-Terminal Helices: A Joint Double Electron-Electron Resonance and FRET Study
- F. Klumpers, U. Götz, T. Kurtz, C. Herrmann, T.M.A. Gronewold, *Sensors and Actuators B* **203** (2014) 904-908. Conformational changes at protein-protein interaction followed online with an SAW biosensor
- K. E. Overkamp, R. Gasper, K. Kock, C. Herrmann, E. Hofmann, N. Frankenberg-Dinkel, *J. Biol. Chem.* **289** (2014) 26691-26707. Insights into the Biosynthesis and Assembly of Cryptophycean Phycobiliproteins
- S. Hartwig, C. Dovengerds, C. Herrmann, B.T. Hovemann, *FEBS J.* **281** (2014) 5147-5158. Drosophila Ebony: a novel type of nonribosomal peptide synthetase related enzyme with unusually fast peptide bond formation kinetics

Physikalische Chemie 2

- D. Peeters, G. Carraro, C. Maccato, H. Parala, A. Gasparatto, D. Barreca, C. Sada, K. Kartaschew, M. Havenith, D. Rogalla, H.-W. Becker, A. Devi, *Physica Status Solidi A* **211**(2) (2014) 316-322. Tailoring iron (III) oxide nanomorphology by chemical vapor deposition: growth and characterization.
- V.-S. Dang, H. Parala, J.H. Kim, K. Xu, N.B. Srinivasan, E. Edengeiser, M. Havenith, A.D. Wieck, T. de los Arcos, R.A. Fischer, A. Devi, *Physica Status Solidi A* **211**(2) (2014) 416-424. Electrical and optical properties of TiO₂ thin films prepared by plasma-enhanced atomic layer deposition.
- G. Di Florio, E. Bründermann, N.S. Yadavalli, S. Santer, M. Havenith, *Soft Matter* **10**(10) (2014) 1544-1554. Polarized 3D Raman and nanoscale near-field optical microscopy of optically inscribed surface relief gratings: chromophore orientation in azo-doped polymer films.
- H. Ogata, E. Decaneto, M. Grossman, M. Havenith, I. Sagi, W. Lubitz, M. Knipp, *Acta Cryst. F* **70**(2) (2014) 232-235. Crystallization and preliminary X-ray crystallographic analysis of the catalytic domain of membrane type 1 matrix metalloproteinase.
- P. Nieto, M. Letzner, T. Endres, G. Schwaab, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**(18) (2014) 8384-8391. IR spectroscopy of pyridine-water conformers in helium nanodroplets.
- J. Sun, G. Niehues, H. Forbert, D. Decka, G. Schwaab, D. Marx, M. Havenith, *J. Am. Chem. Soc.* **136**(13) (2014) 5031-5038. Understanding THz spectra of aqueous solutions: glycine in light and heavy water.
- E.T. Spielberg, E. Edengeiser, B. Mallick, M. Havenith, A.-V. Mudring, *Chemistry - A European Journal* **20**(18) (2014) 5338-5345. 1-Butyl-4-methyl-pyridinium [Cu(SCN)₂]: A coordination polymer and ionic liquid.

- M. Mischo, L. von Kobyletzki, E. Bründermann, D. Schmidt, A. Potthoff, N.H. Brockmeyer, M. Havenith, *Experimental Dermatology* **23**(6) (2014) 446–448. Similar appearance, different mechanisms: Xerosis in HIV, atopic dermatitis and aging.
- K. Meister, J. Duman, Y. Xu, A. DeVries, D. Leitner, M. Havenith, *J. Phys. Chem. B* **118**(28) (2014) 7920-7924. The role of sulfates on antifreeze protein activity.
- M. Senske, L. Törk, B. Born, M. Havenith, C. Herrmann, S. Ebbinghaus, *J. Am. Chem. Soc.* **136**(25) 9036-9041 (2014). Protein stabilization by macromolecular crowding through enthalpy rather than entropy.
- A. Patra, T.Q. Luong, R.K. Mitra, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 12875-12883 (2014). The influence of charge on the structure and dynamics of water encapsulated in reverse micelles.
- G. Di Florio, E. Bründermann, N.S. Yadavalli, S. Santer, M. Havenith, *Soft Materials* **12**, 98-105 (2014). Confocal Raman microscopy and AFM study of the interface between the photosensitive polymer layer and multilayer graphene.
- D. Habig, D. Leicht, M. Kaufmann, G. Schwaab, M. Havenith, *J. Chem. Phys.* **141**(14), 044312/1-044312/6 (2014). IR-spectroscopic study of the allyl + NO reaction in helium nanodroplets.
- V. Conti Nibali, M. Havenith, *J. Am. Chem. Soc.* **136**(37), 12800-12807 (2014). New insights into the role of water in biological function: Studying solvated biomolecules using terahertz absorption spectroscopy in conjunction with molecular dynamics simulations.
- M. Banerjee, V.-S. Dang; M. Bledowski, R. Radim; H.-W. Becker, D. Rogalla, E. Edengeiser, M. Havenith, A. Wieck, A. Devi, *Chemical Vapor Deposition* **20**, 224-233 (2014). MOCVD of TiO₂ thin films using a heteroleptic titanium complex: Precursor evaluation and investigation of optical, photoelectrochemical and electrical properties.
- M. Heyden, G. Schwaab, M. Havenith, *J. Phys. Chem. B.* **118**(36), 10802–10805 (2014). Comment on „Hydration and mobility of trehalose in aqueous solution“.
- G. Di Florio, E. Bründermann, N.S. Yadavalli, S. Santer, M. Havenith, *Nano Letters* **14**(10), 5754-5760 (2014). Graphene multilayer as nano-sized optical strain gauge for polymer surface relief gratings.
- V. Sharma, F. Böhm, G. Schwaab, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**(45), 25101-25110 (2014). The low frequency motions of solvated Mn(II) and Ni(II) ions and their halide complexes.
- J. Dielmann-Gessner, M. Grossman, V. Conti Nibali, B. Born, I. Solomonov, G.B. Fields, M. Havenith, I. Sagi, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111**, 17857-17862 (2014). Enzymatic turnover of macromolecules generates long lasting protein-water coupled motions beyond reaction steady-state.
- H. Vondracek, J. Dielmann-Gessner, W. Lubitz, M. Knipp, M. Havenith, *J. Chem. Phys.* **141**, 22D534/1-22D534/6 (2014). THz absorption spectroscopy of solvated beta-Lactoglobulin.
- C. Consani, S. Ruetzel, P. Nuernberger, T. Brixner, *J. Phys. Chem. A* **118** (2014) 11364–11372. Quantum control spectroscopy of competing reaction pathways in a molecular switch

- P. K. Verma, F. Koch, A. Steinbacher, P. Nuernberger, T. Brixner, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 14981–14989. Ultrafast UV-induced photoisomerization of intramolecularly H-bonded symmetric β -diketones
- C. Walter, S. Ruetzel, M. Diekmann, P. Nuernberger, T. Brixner, B. Engels, *J. Chem. Phys.* **140** (2014) 224311. Photoisomerization among ring-open merocyanines. II. A computational study
- S. Ruetzel, M. Diekmann, P. Nuernberger, C. Walter, B. Engels, T. Brixner, *J. Chem. Phys.* **140** (2014) 224310. Photoisomerization among ring-open merocyanines. I. Reaction dynamics and wave-packet oscillations induced by tunable femtosecond pulses

Analytische Chemie

- J. Tymoczko, F. Calle-Vallejo, V. Colic, M. Koper, W. Schuhmann, A. Bandarenka, *ACS Catal.* **4** (2014) 3772–3778. Oxygen reduction at a Cu modified Pt(111) model electrocatalyst in contact with Nafion polymer
- J. Tymoczko, W. Schuhmann, M. Gebala, *ACS Appl. Mater. Int.* **6** (2014) 21851–21858. Electrical potential assisted DNA hybridization. How to mitigate electrostatics for surface DNA hybridization
- A.-H. Zinn, S. Borhani-Haghighi, E. Ventosa, J. Pfetzing-Micklich, N. Wieczorek, W. Schuhmann, A. Ludwig, *Phys. Stat. Sol. A: Appl. Mater. Sci.* **11** (2014) 2650–256. Mechanical properties of SiLi_x thin films at different stages of electrochemical Li insertion
- E. Madej, F. La Mantia, W. Schuhmann, E. Ventosa, *Adv. Energy Mater.* **4** (2014) 1400829. Impact of the specific surface area on the memory effect in Li-ion batteries: the case of anatase TiO_2
- S. Klink, P. Weide, E. Ventosa, M. Muhler, W. Schuhmann, F. La Mantia, *ECS Trans.* **62** (2014) 265–271. New insights into SEI formation in lithium ion batteries: Inhomogeneous distribution of irreversible charge losses across graphite
- J. Vivekananthan, R.A. Rincón, V. Kuznetsov, S. Pöller, W. Schuhmann, *ChemElectroChem* **1** (2014) 1901–1908. Biofuel cell cathodes based on bilirubin oxidase immobilized via organic linkers on 3D-hierarchically structured carbon electrodes
- F. Conzuelo, J. Vivekananthan, S. Pöller, J. M. Pingarrón, W. Schuhmann, *ChemElectroChem* **1** (2014) 1854–1858. Immunologic-controlled biofuel cell as a self-powered biosensor for antibiotic residues determination
- X. Chen, M. Shao, S. Pöller, D. A. Guschin, P. Pinyou, W. Schuhmann, *J. Electrochem. Soc.* **161** (2014) H3058–H3063; doi:10.1149/2.0111413jes. PQQ-sGDH bioelectrodes based on Os-complex modified electrodeposition polymers and carbon nanotubes
- F. Zhao, K. Slizoberg, M. Rögner, N. Plumeré, W. Schuhmann, *J. Electrochem. Soc.* **161** (2014) H3035–H3041; doi:10.1149/2.0081413jes. The role of hydrophobicity of Os-complex-modified polymers for photosystem 1 based photocathodes
- R. A. Rincón, J. Masa, S. Mehrpour, F. Tietz, W. Schuhmann, *Chem. Comm.* **50** (2014) 14760–14762. Activation of oxygen evolving perovskites for oxygen reduction by functionalization with Fe- N_x /C groups

- M. Falk, M. Alcalde, P. Bartlett, A. L. De Lacey, L. Gorton, C. Gutierrez-Sanchez, R. Haddad, D. Leech, R. Ludwig, E. Magner, D. M. Mate, P. Ó Conghaile, R. Ortiz, M. Pita, S. Pöller, T. Ruzgas, U. Salaj-Kosla, W. Schuhmann, F. Sebelius, M. Shao, L. Stoica, J. Tilly, M. D. Toscano, J. Vivekananthan, E. Wright, S. Shleev, *Plos one* **9** (2014) e109104. Self-contained biodevices for carbohydrate and oxygen monitoring
- X. Chen, A. Maljusch, R. A. Rincón, A. Battistel, A. S. Bandarenka, W. Schuhmann, *Chem. Comm.* **50** (2014) 13250-13253. Local visualization of catalytic activity at gas evolving electrodes using frequency-dependent scanning electrochemical microscopy
- R. A. Rincón, E. Ventosa, F. Tietz, J. Masa, S. Seisel, V. Kuznetsov, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **15** (2014) 2810-2816. Evaluation of perovskites as electrocatalysts for the oxygen evolution reaction
- E. Ventosa, A. Tymoczko, K. Xie, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, *ChemSusChem* **7** (2014) 2584-2589. Low temperature hydrogen reduction of high surface area anatase TiO₂ and anatase/β-TiO₂ applied in high charging rate Li-ion batteries.
- S. Pöller, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **140** (2014) 101-107. A miniaturized voltammetric pH sensor based on optimized redox polymers
- T. Kothe, S. Pöller, P. Fortgang, M. Rögner, W. Schuhmann, N. Plumeré, *Chem. Eur. J.*, **20** (2014) 11029-11034. Engineered electron-transfer chain in photosystem 1 based photocathodes outperforms electron-transfer rates in natural photosynthesis.
- N. Plumere, O. Rüdiger, A. Alsheikh Oughli, R. Williams, J. Vivekananthan, S. Pöller, W. Schuhmann, W. Lubitz, *Nature Chem.* **6** (2014) 822-827. A redox hydrogel protects hydrogenase from high potential deactivation and oxygen damage.
- S. Klink, W. Schuhmann, F. La Mantia, *ChemSusChem* **7** (2014) 2159-2166. Vertical distribution of cross-currents, overpotentials and irreversible charge losses in graphite electrodes for Lithium ion batteries.
- Z. Sun, X. Huang, F. Liu, X. Yang, C. Rösler, R. Fischer, M. Muhler, W. Schuhmann, *Chem. Comm.* **50** (2014) 10382-10385. Amine-based solvents for exfoliating graphite to graphene outperform the dispersing capacity of *N*-methyl-pyrrolidone and surfactants
- A. Bandarenka, A. Maljusch, V. Kuznetsov, K. Eckhard, W. Schuhmann, *J. Phys. Chem. C* **118** (2014) 8952–8959. Localised impedance measurements for electrochemical surface science
- T. Lostak, A. Maljusch, B. Klink, S. Krebs, M. Kimpel, J. Flock, S. Schulz, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **137** (2014) 65-74. Zr-based conversion layer on Zn-Al-Mg alloy coated steel sheets: insights into the formation mechanism
- J. Masa, W. Xia, I. Sinev, A. Zhao, Z. Sun, S. Grützke, P. Weide, M. Muhler, W. Schuhmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 8508–8512. Mn_xO_y/NC and Co_xO_y/NC nanoparticles embedded in a nitrogen-doped carbon matrix for high performance bifunctional oxygen electrodes. *Angew. Chem.* **126** (2014) 8648–8652. Eine Stickstoff-dotierte Kohlenstoffmatrix mit eingeschlossenen Mn_xO_y/NC- und Co_xO_y/NC-Nanopartikeln für leistungsfähige bifunktionale Sauerstoffelektroden.
- A. Zhao, J. Masa, W. Xia, A. Maljusch, M. Willinger, G. Clavel, K. Xie, R. Schlögl, W. Schuhmann, M. Muhler, *JACS* **136** (2014) 7551-7554. Spinel Mn-Co oxide in N-doped carbon nanotubes as bifunctional electrocatalysts synthesized by oxidative cutting.

- A. R. Zeradjanin, N. Menzel, W. Schuhmann, P. Strasser, *PCCP* **16** (2014) 13741-13747. On the Faradaic selectivity and the role of surface inhomogeneity during the chlorine evolution reaction at ternary Ti-Ru-Ir mixed metal oxide electrocatalysts.
- E. Madej, F. La Mantia, B. Mei, S. Klink, M. Muhler, W. Schuhmann, E. Ventosa, *J. Power Sources* **266** (2014) 155-161. Reliable benchmark material for anatase TiO₂ in Li-ion batteries: on the role of dehydration of commercial TiO₂
- M. Fan, K. Sliozberg, F. La Mantia, N. Miyashita, M. Hagymási, Ch. Schnitter, A. Ludwig, W. Schuhmann, *ChemElectroChem* **1** (2014) 903-908. Characterization of Ta-Ti thin films by means of a scanning droplet cell combined with AC-linear sweep voltammetry.
- V. Hartmann, T. Kothe, S. Pöller, E. El-Mohsnawy, M. M. Nowaczyk, N. Plumeré, W. Schuhmann, M. Rögner, *PCCP* **16** (2014) 11936-11941. Redox hydrogels with adjusted redox potential for improved efficiency in Z-scheme inspired biophotovoltaic cells
- E. Madej, E. Ventosa, S. Klink, F. La Mantia, W. Schuhmann, *PCCP* **16** (2014) 7939-7945. Aging effects of anatase TiO₂ nanoparticles in Li-ion batteries
- J. Clausmeyer, W. Schuhmann, N. Plumeré, *TrAC* **58** (2014) 23-30. Electrochemical patterning as tool for biomolecule microarray fabrication
- Z. Sun, J. Vivekananthan, D. A. Guschin, X. Huang, V. Kuznetsov, P. Ebbinghaus, A. Sarfraz, M. Muhler, W. Schuhmann, *Chem. Eur. J.* **20** (2014) 5752-5761. High-concentration graphene dispersions with minimal stabilizer: a scaffold for enzyme immobilization for glucose oxidation
- Z. Sun, K. Xie, Z. An Li, I. Sinev, P. Ebbinghaus, A. Erbe, M. Farle, W. Schuhmann, M. Muhler, E. Ventosa, *Chem. Eur. J.* **20** (2014) 2022-2030. Hollow and yolk-shell iron oxide nanostructures on few-layer graphene in Li-ion batteries
- R. Samba, K. Fuchsberger, I. Matychyn, S. Epple, L. Kiesel, A. Stett, W. Schuhmann, M. Stelzle, *Electroanalysis* **26** (2014) 548-555. Application of PEDOT-CNT microelectrodes for neurotransmitter sensing
- F. Conzuelo, L. Stratmann, S. Grütze, J. M. Pingarrón, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **26** (2014) 481-487. Detection and quantification of sulfonamide antibiotic residues in milk using scanning electrochemical microscopy.
- V. Kuznetsov, A. Maljusch, R. M. Souto, A. S. Bandarenka, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **44** (2014) 38-41. Characterisation of localised corrosion processes using scanning electrochemical impedance microscopy
- Z. Sun, X. Huang, M. Muhler, W. Schuhmann, E. Ventosa, *Chem. Comm.* **50** (2014) 5506-5509. Carbon-coated TiO₂ (B) nanosheets composite for lithium ion batteries
- E. Madej, M. Espig, R. R. Baumann, W. Schuhmann, F. La Mantia, *J. Power Sources*, **261** (2014) 356-362. Optimization of primary printed batteries based on Zn/MnO₂
- G.W. Busser, B. Mei, A. Pougin, J. Strunk, R. Gutkowski, W. Schuhmann, M. Willinger, R. Schlögl, M. Muhler, *ChemSusChem* **7** (2014) 1030-1032. Stepwise reductive photo-deposition of copper and chromia on gallium oxide applied in photocatalytic water splitting to elucidate the role of the co-catalysts

- M. Shao, D. A. Guschin, Z. Kawah, Y. Beyl, L. Stoica, R. Ludwig, W. Schuhmann, X. Chen; *Electrochim. Acta* **128** (2014) 318-325. Cellobiose dehydrogenase entrapped with-in specifically designed Os-complex modified electrodeposition polymers as potential anodes for biofuel cells.
- J. Masa, A. Zhao, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **128** (2014) 271-278. Metal-free catalysts for oxygen reduction in alkaline electrolytes: Influence of the presence of Co, Fe, Mn and Ni inclusions
- O. V. Smutok, K. V. Dmytruk, M. I. Karkovska, W. Schuhmann, M. V. Gonchar, A. A. Sibirny, *Talanta*, **125** (2014) 227-232. D-lactate-selective amperometric biosensor based on the cell debris of the recombinant yeast *Hansenula polymorpha*
- J. Clausmeyer, J. Henig, W. Schuhmann, N. Plumeré, *ChemPhysChem* **15** (2014) 151-156. Scanning droplet cell for chemoselective patterning via local electroactivation of protected quinone monolayers
- J. Masa, C. Batchelor-McAuley, W. Schuhmann, R. G. Compton, *Nano Res.* **7** (2014) 71-78. Koutecky-Levich analysis applied to nanoparticle modified rotating disk electrodes: Electrocatalysis or misinterpretation?
- P. Actis, S. Tokar, J. Clausmeyer, B. Babakinejad, S. Mikhaleva, R. Cornut, Y. Takahashi, P. Novak, A. Shevchuck, J. A. Dougan, S. G. Kazarian, P. Gorelkin, P. R. Unwin, W. Schuhmann, D. Klenerman, E. Sviderskaya, Y. Korchev. *ACS Nano* **8** (2014) 875-884. Electrochemical nanoprobe for single-cell analysis
- A. R. Zeradjanin, A. A. Topalov, Q. Van Overmeere, S. Cherevko, X. Chen, E. Ventosa, W. Schuhmann, K. J. J. Mayrhofer, *RSC Adv.* **4** (2014) 9579-9587. Rational design of the electrode morphology for oxygen evolution – enhancing the performance for catalytic water oxidation
- A. Bandarenka, E. Ventosa, A. Maljusch, J. Masa, W. Schuhmann, *The Analyst*, **139** (2014) 1274-1291. Techniques and methodologies in modern electrocatalysis: evaluation of activity, selectivity and stability of catalytic materials
- C. Andronescu, S. Pöller, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **41** (2014) 12-15. Electrochemically induced deposition of poly(benzoxazine) precursors as immobilization matrix for enzymes
- M. Nebel, T. Erichsen, W. Schuhmann, *Beilstein J. Nanotechnol.* **5** (2014) 141-151. Constant-distance mode SECM as a tool to visualize local electrocatalytic activity of oxygen reduction catalysts
- J. Tymoczko, W. Schuhmann, A. S. Bandarenka, *ChemElectroChem* **1** (2014) 213-219. Position of Cu atoms at the Pt(111) electrode surfaces controls electrosorption of (bi)sulfate anions from H₂SO₄ electrolytes
- J. Clausmeyer, P. Actis, A. López Córdoba, Y. Korchev, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **40** (2014) 28-30. Nanosensors for the detection of hydrogen peroxide
- A. Maljusch, E. Ventosa, R.A. Rincón, A.S. Bandarenka, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **38** (2014) 142–145. Revealing onset potentials using electrochemical microscopy to assess the catalytic activity of gas-evolving electrodes.
- A. Maljusch, J. B. Henry, J. Tymoczko, A. S. Bandarenka, W. Schuhmann, *RSC Adv.* **4** (2014) 1532-1537. Characterisation of non-uniform functional surfaces: Linking basic surface properties with electrocatalytic activity.

Theoretische Chemie

- Md. E. Ali, N. N. Nair, M. Retegan, F. Neese, V. Staemmler, D. Marx, *J. Biol. Inorg. Chem.* **19** (2014) 1287-1293. The iron-sulfur core in Rieske proteins is not symmetric
- L. Martinez-Suarez, J. Frenzel, D. Marx, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16** (2014) 26119-26136. Cu/ZnO nanocatalysts in response to environmental conditions: surface morphology, electronic structure, redox state and CO₂ activation,
- P. Anjukandi, P. Dopieralski, J. Ribas-Arino, D. Marx, *PLOS ONE* **9** (2014) e108812-1-7. The Effect of Tensile Stress on the Conformational Free Energy Landscape of Disulfide Bonds
- C. Drechsel-Grau D. Marx, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 10937-10940 featured as a VIP (Very Important Paper). Exceptional Isotopic-Substitution Effect: Breakdown of Collective Proton Tunneling in Hexagonal Ice due to Partial Deuteration
- J. Frenzel D. Marx, *J. Chem. Phys.* **141** (2014) 124710-1-20. Methanol synthesis on ZnO(000 $\bar{1}$). IV. Reaction mechanisms and electronic structure
- F. Uhl, L. Walewski, H. Forbert, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **141** (2014) 104110-1-12. Adding flexibility to the "particles-on-a-sphere" model for large-amplitude motion: POSflex force field for protonated methane
- M. Farnesi Camellone D. Marx, *J. Phys. Chem. C* **118** (2014) 20989-21000. Nature and Role of Activated Molecular Oxygen Species at the Gold/Titania Interface in the Selective Oxidation of Alcohols,
- J. Sun, G. Niehues, H. Forbert, D. Decka, G. Schwaab, D. Marx, M. Havenith, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 5031-5038. Understanding THz Spectra of Aqueous Solutions: Glycine in Light and Heavy Water
- L. Walewski, H. Forbert, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **140** (2014) 144305-1-14. Solvation of molecules in superfluid helium enhances the "interaction induced localization" effect
- C. Drechsel-Grau D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **112** (2014) 148302-1-5. Quantum Simulation of Collective Proton Tunneling in Hexagonal Ice Crystals
- M. Krupicka, W. Sander, D. Marx, *J. Phys. Chem. Lett.* **5** (2014) 905-909. Mechanical Manipulation of Chemical Reactions: Reactivity Switching of Bergman Cyclizations,
- L. Walewski, H. Forbert, D. Marx, *Comput. Phys. Commun.* **185** (2014) 884-899. Reactive path integral quantum simulations of molecules solvated in superfluid helium
- J. Behler, *J. Phys.: Condens. Matter* **26** (2014) 183001. Representing Potential-Energy Surfaces by High-Dimensional Neural Network Potentials
- C. M. Handley, J. Behler, *Eur. Phys. J. B* **87** (2014) 152. Next-Generation Interatomic Potentials for Condensed Systems
- G. C. Sosso, J. Colombo, J. Behler, E. Del Gado, M. Bernasconi, *J. Phys. Chem. B* **118** (2014), 13621. Dynamical heterogeneity in the supercooled liquid state of the phase change material GeTe

- D. H. Friese, L. Törk, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **141** (2014) 194106. Vibrational frequency scaling factors for correlation consistent basis sets and the methods CC2 and MP2 and their spin-scaled SCS and SOS variants.
- G. Schmitz, C. Hättig, D. P. Tew, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16** (2014) 22167-22178. Explicitly correlated PNO-MP2 and PNO-CCSD and its application to the S66 set and large molecular systems.
- B. Helmich, C. Hättig, *Comput. Theor. Chem.* **1040-1041** (2014) 35-44. A pair natural orbital based implementation of ADC(2)-x: Perspectives and challenges for response methods for singly and doubly excited states in large molecules.
- S. Schöler, M. H. Wahl, N. I. C. Wurster, A. Puls, C. Hättig, G. Dyker, *Chem. Commun.* **50** (2014) 5909-5911. Bidentate cycloimidate palladium complexes with aliphatic and aromatic anagostic bonds.
- P. Okrasinski, Z. Ltajka, C. Hättig, *J. Phys. Chem. C* **118** (2014) 4483-4488. Theoretical Study on Noncovalent Interactions in the Carbon-Nanotube-Formic Acid Dimer System.
- D. Friese, C. Hättig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16** (2014) 5942-5951. Optical rotation calculations on large molecules using the approximate coupled cluster model CC2 and the resolution-of-the-identity approximation.
- C. J. Nelin, F. Uhl, V. Staemmler, P. S. Bagus, Y. Fujimori, M. Sterrer, H. Kühlenbeck, H.-J. Freund, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16** (2014) 21953-21956. Surface core-level binding energy shifts for MgO(100).
- Md. E. Ali, N. N. Nair, M. Retegan, F. Neese, V. Staemmler, D. Marx, *J. Biol. Inorg. Chem.*, **19** (2014) 1287-1293. The iron-sulfur core in Rieske proteins is not symmetric.
- S. Eggensperger, O. Fiset, D. Parcej, L. Schäfer, R. Tampé, *J. Biol. Chem.* **289** (2014) 33098-33108. An annular lipid belt is essential for allosteric coupling and viral inhibition of the antigen translocation complex TAP.
- A. Schönweiz, R. Franke, in: *Supported Ionic Liquids — Fundamentals and Applications*, R. Fehrmann, A. Riisager, M. Haumann, (Eds.), pp 307-326, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 2014. Supported Ionic Liquid Phase (SILP) Materials in Hydroformylation Catalysis
- S. Gueven, M. M. L. Nieuwenhuizen, B. Hamers, R. Franke, M. Piske, M. Becker, D. Vogt, *ChemCatChem*, **6**, (2014), 603-610. Kinetic Explanation for the Temperature Dependence of the Regioselectivity in the Hydroformylation of Neohexene
- S. Gueven, B. Hamers, R. Franke, M. Piske, M. Becker, D. Vogt, *Catal. Sci. Technol.*, **4**, (2014), 524-530. Kinetics of cyclooctene hydroformylation for continuous homogeneous catalysis
- A. Pews-Davtyan, X. Fang, R. Jackstell, A. Spannenberg, W. Baumann, R. Franke, M. Beller, *Chem. Asian J.*, **9**, (2014), 1168-1174. Synthesis of New Diphosphine Ligands and their Application in Pd-Catalyzed Alkoxyacylation Reactions
- M. Becker, R. Franke, I. Hamann, *cpp - chemical plants & processes*, (3-2014), 58-60, More insights into bubble columns
- B. Elsler, D. Schollmeyer, K. M. Dyballa, R. Franke, S. R. Waldvogel, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **53**, (2014), 2949-2953. Metal- and Reagent-Free Highly Selective Anodic Cross-Coupling Reaction of Phenols

- Q. Liu, L. Wu, I. Fleischer, D. Selent, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *Chem. Eur. J.*, **20**, (2014), 6888-6894. Development of a Ruthenium/Phosphite Catalyst System for Domino Hydroformylation-Reduction of Olefins with Carbon Dioxid
- C. Kubis, W. Baumann, E. Barsch, D. Selent, M. Sawall, R. Ludwig, K. Neymeyr, D. Hess, R. Franke, A. Börner, *ACS Catal.*, **4**, (2014), 2097-2108. Investigations into the Equilibrium of Iridium Catalysts for the Hydroformylation of Olefins by Combining In Situ High-Pressure FTIR and NMR Spectroscopy
- A. Dutta Chowdhury, N. Weding, J. Julis, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **53**, (2014), 6477-6481. Towards a Practical Development of Light-Driven Acceptorless Alkane Dehydrogenation
- E. Benetskiy, S. Lühr, M. Vilches-Herrera, D. Selent, H. Jiao, L. Domke, K. Dyballa, R. Franke, A. Börner, *ACS Catal.*, **4**, (2014), 2130-2136. Rhodium-Catalyzed Nonisomerizing Hydroformylation of Methyl Oleate Applying Lactam-Based Phosporamidite Ligands
- S. Gülak, L. Wu, Q. Liu, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **53**, (2014), 7320-7323. Phosphine- and Hydrogen-Free: Highly Regioselective Ruthenium-Catalyzed Hydroaminomethylation of Olefine
- M. Becker, R. Franke, I. Hamann, *CHEMXTRA*, (9-2014), 24-27. Mehr Einblick in Blasensäulen
- M. Sawall, C. Kubis, R. Franke, D. Hess, D. Selent, A. Börner, K. Neymeyr, *ACS Catal.*, **4**, (2014), 2836-2843. How to Apply the Complementarity and Coupling Theorems in MCR Methods: Practical Implementation and Application to the Rhodium-Catalyzed Hydroformylation
- T. Seifert, P. Fakner, S. Sievers, F. Stenger, B. Hamers, M. Priske, M. Becker, R. Franke, G. Schembecker, C. Bramsiepe, *Chem. Eng. Proc.*, **85**, (2014), 1-9. Intensified hydroformylation as an example for flexible intermediates production
- M. Becker, R. Franke, I. Hamann, *cav – chemie anlagen verfahren*, (9-2014), 58-60. Blasensäulen im Auftrieb
- X. Fang, R. Jackstell, R. Franke, M. Beller, *Chem. Eur. J.*, **20**, (2014), 13210-13216. Highly Selective Synthesis of α,β -Unsaturated Aldehydes from Olefins
- L. Wu, I. Fleischer, M. Zhang, Q. Liu, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *ChemSusChem*, **7**, (2014), 3260-3263. Using Aqueous Ammonia in Hydroaminomethylation Reactions: Ruthenium-Catalyzed Synthesis of Tertiary Amines

Technische Chemie

- K. Mette, S. Kühl, H. Düdder, K. Kähler, A. Tarasov, M. Muhler, M. Behrens, *ChemCatChem* **6** (2014) 100-104. Stable Performance of Ni Catalysts in the Dry Reforming of Methane at High Temperatures for the Efficient Conversion of CO₂ into Syngas
- S. Neubert, A. Ramakrishnan, J. Strunk, H. Shi, B. Mei, L. Wang, M. Bledowski, D.A. Guschin, M. Kauer, Y. Wang, M. Muhler, R. Beranek, *ChemPlusChem* **79** (2014) 163-170. Surface-Modified TiO₂ Photocatalysts Prepared by a Photosynthetic Route: Mechanism, Enhancement, and Limits
- H. Düdder, K. Kähler, B. Krause, K. Mette, S. Kuhl, M. Behrens, V. Scherer, M. Muhler, *Catal. Sci. Technol.* **4** (2014) 3317-3328. The role of carbonaceous deposits in the activity and stability of Ni-based catalysts applied in the dry reforming of methane
- M.C. Holz, K. Tölle, M. Muhler, *Catal. Sci. Technol.* **4** (2014) 3495-3504. Gas-phase oxidation of ethanol over Au/TiO₂ catalysts to probe metal-support interactions
- L. M. Chew, H. Ruland, H.J. Schulte, W. Xia, M. Muhler, *J. Chem. Sci.* **126** (2014) 481-486. CO₂ hydrogenation to hydrocarbons over iron nanoparticles supported on oxygen-functionalized carbon nanotubes
- G.W. Busser, B. Mei, A. Pougin, J. Strunk, R. Gutkowski, W. Schuhmann, M.-G. Willinger, R. Schlögl, M. Muhler, *ChemSusChem* **7** (2014) 1030-1034. Photodeposition of Copper and Chromia on Gallium Oxide: The Role of Co-Catalysts in Photocatalytic Water Splitting
- V.I. Alexiadis, J.W. Thybaut, P.N. Kechagiopoulos, M. Chaar, A.C. Van Veen, M. Muhler, G.B. Marin, *Appl. Catal. B: Environmental* **150-151** (2014) 496-505. Oxidative coupling of methane: catalytic behaviour assessment via comprehensive microkinetic modelling
- Z. Sun, J. Vivekananthan, D.A. Guschin, X. Huang, V. Kuznetsov, P. Ebbinghaus, A. Sarfraz, M. Muhler, W. Schuhmann, *Chem. Eur. J.* **20** (2014) 5752-5761. High-Concentration Graphene Dispersions with Minimal Stabilizer: A Scaffold for Enzyme Immobilization for Glucose Oxidation
- J. Masa, A. Zhao, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, Metal-free catalysts for oxygen reduction in alkaline electrolytes: Influence of the presence of Co, Fe, Mn and Ni inclusions, *Electrochim. Acta* **128** (2014) 271-278.
- K. Voelskow, M.J. Becker, W. Xia, M. Muhler, T. Turek, *Chem. Eng. J.* **244** (2014) 68-74. The influence of kinetics, mass transfer and catalyst deactivation on the growth rate of multiwalled carbon nanotubes from ethene on a cobalt-based catalyst
- Z. Sun, X. Huang, M. Muhler, W. Schuhmann, E. Ventosa, *Chem. Commun.* **50** (2014) 5506-5509. A carbon-coated TiO₂(B) nanosheet composite for lithium ion batteries
- A. Zhao, J. Masa, W. Xia, A. Maljusch, M.-C. Willinger, G. Clavel, K. Xie, R. Schlögl, W. Schuhmann, M. Muhler, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 7551-7554. Spinel Mn-Co Oxide in N-Doped Carbon Nanotubes as a Bifunctional Electrocatalyst Synthesized by Oxidative Cutting
- J. Gao, P. Ngene, M. Herrich, W. Xia, O. Gutfleisch, M. Muhler, K.P. de Jong, P.E. de Jongh, *Int. J. Hydrogen Energ.* **39** (2014) 10175-10183. Interface effects in NaAlH₄-carbon nanocomposites for hydrogen storage

- S. Neubert, P. Pulisova, C. Wiktor, P. Weide, B. Mei, D.A. Guschin, R.A. Fischer, M. Muhler, R. Beranek, *Catal. Today* **230** (2014) 97-103. Enhanced photocatalytic degradation rates at rutile TiO₂ photocatalysts modified with redox co-catalysts
- O. Kozachuk, I. Luz, F.X. Llabrés i Xamena, H. Noei, M. Kauer, H. Bauke Albada, E.D. Bloch, B. Marler, Y. Wang, M. Muhler, R.A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 7058-7062. Multifunctional, Defect-Engineered Metal-Organic Frameworks with Ruthenium Centers: Sorption and Catalytic Properties
- M.B. Fichtl, J. Schumann, I. Kasatkin, N. Jacobsen, M. Behrens, R. Schlögl, M. Muhler, O. Hinrichsen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 7043-7047. Counting of Oxygen Defects versus Metal Surface Sites in Methanol Synthesis Catalysts by Different Probe Molecules
- Z. Fang, J.P. Dürholt, M. Kauer, W. Zhang, C. Lochenie, B. Jee, H. Bauke Albada, N. Metzler-Nolte, A. Pöpl, B. Weber, M. Muhler, Y. Wang, R. Schmid, R.A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 9627-9636. Structural Complexity in Metal-Organic Frameworks: Simultaneous Modification of Open Metal Sites and Hierarchical Porosity by Systematic Doping with Defective Linkers
- L.M. Chew, P. Kangvansura, H. Ruland, H.J. Schulte, C. Somsen, W. Xia, G. Eggeler, A. Worayingyong, M. Muhler, *Appl. Catal. A: General* **482** (2014) 163-170. Effect of nitrogen doping on the reducibility, activity and selectivity of carbon nanotube-supported iron catalysts applied in CO₂ hydrogenation
- E. Ventosa, A. Tymoczko, K. Xie, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, *ChemSusChem* **7** (2014) 2584-2589. Low temperature Hydrogen Reduction of High Surface Area Anatase and Anatase/beta-TiO₂ for High-Charging-Rate Batteries
- Z. Sun, X. Huang, F. Liu, X. Yang, C. Rösler, R.A. Fischer, M. Muhler, W. Schuhmann, *Chem. Commun.* **50** (2014) 10382-10385. Amine-based solvents for exfoliating graphite to graphene outperform the dispersing capacity of N-methyl-pyrrolidone and surfactants
- A. Tarasov, H. Düdder, K. Mette, S. Kühl, K. Kähler, R. Schlögl, M. Muhler, M. Behrens, *Chem. Ing. Tech.* **86** (2014) 1916-1924. Investigation of Coking During Dry Reforming of Methane by Means of Thermogravimetry
- H. Ruland, W. Busser, H. Otto, M. Muhler, *Chem. Ing. Tech.* **86** (2014) 1890-1893. Effect of Constant-Rate Reduction on the Performance of a Ternary Cu/ZnO/Al₂O₃ Catalyst in Methanol Synthesis
- W. Grünert, D. Großmann, H. Noei, M.-M. Pohl, I. Sinev, A. De Toni, Y. Wang, M. Muhler, *Chem. Ing. Tech.* **86** (2014) 1883-1889. How Different Characterization Techniques Elucidate the Nature of the Gold Species in a Polycrystalline Au/TiO₂ Catalyst
- E. Madej, F. La Mantia, B. Mei, S. Klink, M. Muhler, W. Schuhmann, E. Ventosa, *J. Power Sources* **266** (2014) 155-161. Reliable benchmark material for anatase TiO₂ in Li-ion batteries: On the role of dehydration of commercial TiO₂
- J. Schartner, K. Gavriljuk, A. Nabers, P. Weide, M. Muhler, K. Gerwert, C. Kötting, *ChemBioChem* **15** (2014) 2529-2534. Immobilization of Proteins in their Physiological Active State at Functionalized Thiol Monolayers on ATR-Germanium Crystals
- P. Sudarsanam, B. Mallesham, P. S. Reddy, B. M. Reddy, D. Großmann, W. Grünert, *Appl. Catal. B* **144** (2014) 900-908. Nano-Au/CeO₂ catalysts for CO oxidation: Influence of dopants (Fe, La, and Zr) on the physicochemical properties and catalytic activity

- M. Stekrova, N. Kumar, A. Aho, I. Sinev, W. Grünert, J. Dahl, J. Roine, S. S. Arzumanov, P. Mäki-Arvela, D. Yu. Murzin, *Appl. Catal.* **470** (2014) 162-176. Isomerization of α -pinene oxide using Fe-supported catalysts: Selective synthesis of campholenic aldehyde
- D. Lehr, D. Großmann, W. Grünert, S. Polarz, *RSC Nanoscale* **6** (2014) 1698-1706. "Dirty nanostructures": Aerosol-assisted synthesis of temperature stable mesoporous metal oxide semiconductor spheres comprising hierarchically assembled zinc oxide nanocrystals controlled via impurities.
- W. Grünert, Chapter 7, in "Urea-SCR Technology for deNO_x After Treatment of Diesel Exhausts", (I. Nova, E. Tronconi, Eds.), *Springer*, 2014, S. 181-220. Active Sites of Selective Catalytic Reduction
- S. Shuvaev, V. Utochnikova, L. Marciniak, A. Freidzon, I. Sinev, R. Van Deun, R. O. Freire, Y. Zubavichus, W. Grünert, N. Kuzmina, *Dalton Transactions* **43** (2014) 3121-3136. Lanthanide complexes with aromatic o-phosphorylated ligands: synthesis, structure elucidation and photophysical properties
- I. Ellmers, R. Pérez Vélez, U. Bentrup, A. Brückner, W. Grünert, *J. Catal.* **311** (2014), 199-211. Oxidation and Selective Reduction of NO over Fe-ZSM-5 – How related are these reactions?
- W. Grünert, D. Großmann, H. Noei, M. M. Pohl, I. Sinev, A. De Toni, Yuemin Wang, M. Muhler, *Angewandte Chemie Int. Ed.* **53** (2014), 3245-3249. Low-temperature CO Oxidation with TiO₂-supported Au³⁺ ions. Deutsch: W. Grünert, D. Großmann, H. Noei, M. M. Pohl, I. Sinev, A. De Toni, Yuemin Wang, M. Muhler, *Angewandte Chemie* **126** (2014) 3309-3313. Tieftemperatur-CO-Oxidation mit Au³⁺-Ionen auf TiO₂
- R. Pérez Vélez, I. Ellmers, Heming Huang, U. Bentrup, V. Schünemann, W. Grünert, A. Brückner, *J. Catal.* **316** (2014) 103-111. Identifying active sites for fast NH₃-SCR of NO/NO₂ mixtures over Fe-ZSM-5 by operando EPR and UV-vis spectroscopy
- Nassr, A. B., Sinev, I., Grünert, W., Bron, M., *ACS Catalysis* **4** (2014) 2449-2462. Rapid microwave-assisted polyol reduction for the preparation of highly active PtNi/CNT electrocatalysts for methanol oxidation
- Guangjun Wu, Yao Hao, Nan Zhang, Naijia Guan, Landong Li, Wolfgang Grünert, *Microporous Mesopor. Mater.* **198** (2014) 82-91. Oxidative dehydrogenation of propane with nitrous oxide over extra-framework Fe-O-Al species occluded in ZSM-5: Reaction and deactivation mechanism
- J. Masa, W. Xia, I. Sinev, A. Q. Zhao, Z. Y. Sun, S. Grützke, P. Weide, M. Muhler, W. Schuhmann, *Angewandte Chemie Int. Ed.* **53** (2014) 8508-8512. Mn_xO_y/NC and Co_xO_y/NC Nanoparticles Embedded in a Nitrogen-Doped Carbon Matrix for High-Performance Bifunctional Oxygen Electrodes. Deutsch: J. Masa, W. Xia, I. Sinev, A. Q. Zhao, Z. Y. Sun, S. Grützke, P. Weide, M. Muhler, W. Schuhmann, *Angewandte Chemie* **126** (2014) 8648-8652. Eine stickstoffdotierte Kohlenstoffmatrix mit eingeschlossenen Mn_xO_y/NC- und Co_xO_y/NC-Nanopartikeln für leistungsfähige bifunktionale Sauerstoffelektroden
- Z. Y. Sun, K. P. Xie, Z. A. Li, Zi An, I. Sinev, P. Ebbinghaus, A. Erbe, M. Farle, W. Schuhmann, M. Muhler, E. Ventosa, *Chem. Eur. J.* **20** (2014) 2022-2030. Hollow and Yolk-Shell Iron Oxide Nanostructures on Few-Layer Graphene in Li-Ion Batteries
- M. S. Hamdy, R. Amrollahi, I. Sinev, B. Mei, G. Mul, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 594-597. Strategies to Design Efficient Silica-Supported Photocatalysts for Reduction of CO₂

- O. Kozachuk, I. Luz, F. X. Llabres i Xamena, H. Noei, M. Kauer, E. D. Bloch, B. Marler, Y. Wang, M. Muhler, R. A. Fischer, *Angew.Chem.* **126** (2014) 7178-7182. Multifunktionale, defect-manipulierte Ru-MOFs: Sorption und katalytische Eigenschaften.
- Z. Fang, J. P. Dürholt, M. Kauer, W. Zhang, O. Kozachuk, B. Albada, N. Metzler-Nolte, M. Muhler, Y. Wang, R. Schmid, and R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **136** (2014) 9627-9636. Structural complexity in metal-organic frameworks: simultaneous modification of open metal sites and hierarchical porosity by systematic doping with defective linkers
- M. Xu, Y. Wang, S. Hu, R. Xu, Y. Cao, S. Yan, *Phys.Chem.Phys.Chem.* **16** (2014) 14682-14687. NO adsorption and reaction on single crystal rutile TiO₂(110) surfaces studied using UHV-FTIRS
- Z. Xiao, X. Wang, J. Xiu, Y. Wang, C. T. Williams, C. Liang, *Catal. Today*, **234** (2014) 200-207, Synergetic effect between Cu⁰ and Cu⁺ in the Cu-Cr catalysts for hydrogenolysis of glycerol

Biochemie 1

- J. Trippe, K. Steinke, A. Orth, P.M. Faustmann, M. Hollmann, C.G. Haase, *Neuroimmunomodulation* **21**(4) (2014) 189-194. Autoantibodies to glutamate receptor antigens in multiple sclerosis and Rasmussen's encephalitis
- G. Seebohm, E. Wrobel, M. Pusch, M. Dicks, J. Terhag, V. Matschke, I. Rothenberg, N.-O. Ursu, F. Hertel, L. Pott, F. Lang, E. Schulze-Bahr, M. Hollmann, R. Stoll, N. Strutz-Seebohm, *Pflügers Archiv - European Journal of Physiology* **466**(10) (2014) 1885-1897. Structural basis of PI(4,5)P₂-dependent regulation of GluA1 by phosphatidylinositol-5-phosphate 4-kinase, Type II, alpha (PIP5K2A)
- M.I.K. Hamad, A. Jack, O. Klatt, M. Lorkowski, T. Strasdeit, S. Kott, C. Sager, M. Hollmann, P. Wahle, *Development* **141**(8) (2014) 1737-1748. Type-I TARPs promote dendritic growth of early postnatal neocortical pyramidal cells in organotypic cultures
- K. Eckey, E. Wrobel, N. Strutz-Seebohm, L. Pott, N. Schmitt, and G. Seebohm, *Journal of Biological Chemistry* **289**(33) (2014) 22749-22758. Novel Kv7.1-phosphatidylinositol 4,5-bisphosphate interaction sites uncovered by charge neutralization scanning
- S.C. Haering, D. Tapken, S. Pahl, M. Hollmann, *Membranes* **4** (3) (2014) 469-490. Auxiliary subunits: shepherding AMPA receptors to the plasma membrane. *Open Access*
- S. Pahl, D. Tapken, S.C. Haering, M. Hollmann, *Membranes* **4** (3) (2014) 565-595. Trafficking of kainate receptors. *Open Access*
- D. Kudryavtsev, T. Makarieva, N. Utkina, E. Santalova, E. Kryukova, C. Methfessel, V. Tsetlin, V. Stonik, I. Kasheverov, *Marine Drugs* **12**(4) (2014) 1859-1875. Marine natural products acting on the acetylcholine-binding protein and nicotinic receptors: from computer modeling to binding studies and electrophysiology

Biochemie 2

- R. Heumann, R. Moratalla, M. T. Herrero, K. Chakrabarty, R. Drucker-Colín, J.R., Garcia-Montes, N. Simola, and M. Morelli, *J Neurochem* **130** (2014) 472-89. Dyskinesia in Parkinson's disease: mechanisms and current non-pharmacological interventions.
- D. Thatenhorst, J. Rheinlaender, T.E. Schäffer, I.D. Dietzel, P. Happel, *Anal. Chem.* **86** (2014), 9838-9845. Effect of Sample Slope on Image Formation in Scanning Ion Conductance Microscopy. doi: 10.1021/ac5024414.
- G. Seeböhm, E. Wrobel, M. Pusch, M. Dicks, J. Terhag, V. Matschke, I. Rothenberg, O.N. Ursu, F. Hertel, L. Pott, F. Lang, E. Schulze-Bahr, M. Hollmann, R. Stoll, N. Strutz-Seeböhm, *Pflugers Arch.* **466** (2014) 1885–1889. Structural basis of PI(4,5)P₂-dependent regulation of GluA1 by phosphatidylinositol-5-phosphate 4-kinase, type II, alpha (PIP5K2A).
- P. M. Düppe, Tran Thi Phuong, J. Autzen, M. Schöpel, K. T. Yip, R. Stoll, J. Scherkenbeck, *ACS Chem. Biol.* **9** (2014) 1755–1763. Sequence-selective molecular recognition of the C-terminal CaaX-boxes of Rheb and related Ras-proteins by synthetic receptors
- D. Díaz-Carballo, A. H. Acikelli, W. Bardenheuer, S. Gustmann, S. Malak, R. Stoll, T. Kedzierski, M. A. Nazif, H. Jastrow, G. Wennemuth, P. Dammann, M. Feigel, D. Strumberg, *Int. J. Clin. Pharmacol. Ther.* **52** (2014) 787–801.
- Hartwig S, Dovengerds C, Herrmann C, Hovemann BT. *FEBS J.* 2014 Nov;281(22):5147-58. Drosophila Ebony: a novel type of nonribosomal peptide synthetase related enzyme with unusually fast peptide bond formation kinetics.

Didaktik der Chemie

- K. Sommer, J. Lorke, Ch. Mattiesson (Hrsg.): Publizieren in Zeitschriften für Forschung und Unterrichtspraxis – Ein Element der Wissenschaftskommunikation in den Fachdidaktiken und Bildungswissenschaften. Klinkhardt Verlag, Bad Heilbrunn 2014.
- Th. Ph. Schröder, H. Steff, K. Sommer: Untersuchen wie die Profis – Modellierung von Staubexplosionen mit der Low-Cost-Hartmannapparatur. In: K. Sommer, J. Lorke & Ch. Mattiesson (Hrsg.): Publizieren in Zeitschriften für Forschung und Unterrichtspraxis – Ein Element der Wissenschaftskommunikation in den Fachdidaktiken und Bildungswissenschaften. Klinkhardt Verlag, Bad Heilbrunn 2015, S. 85-93.
- H. Steff, Th. Ph. Schröder, J. Lorke: Kriteriengeleitete Identifizierung von Modellexperimenten in Chemie-Schulbüchern. In: K. Sommer, J. Lorke & Ch. Mattiesson (Hrsg.): Publizieren in Zeitschriften für Forschung und Unterrichtspraxis – Ein Element der Wissenschaftskommunikation in den Fachdidaktiken und Bildungswissenschaften. Klinkhardt Verlag, Bad Heilbrunn 2015, S. 79-84.

- A. Sauer, K. Sommer: Untersuchung von Chemie-Schulbüchern in Bezug auf materialwissenschaftliche Inhalte – dargestellt am Verfahren der Werkstoffprüfung. In: P. Knecht, E. Matthes, S. Schütze & B. Aamotsbakken (Hrsg.): Methodologie und Methoden der Schulbuch- und Lehrmittelforschung. Klinkhardt Verlag, Bad Heilbrunn 2014, S. 175-185.
- C. Frank, A. Sauer, K. Sommer, M. Niethammer, *Unterricht Chemie* **25** (2014) 140, S. 39-44. Optimale Werkstoffe. Themen der Materialwissenschaften für den Chemieunterricht.
- H. Steff, S. Venke, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **25** (2014) 141, S. 34-37. Baustoff der Zukunft - Holz oder Beton? Kompetenzen im Bereich Kommunikation fördern.

Promotionen 2014

Clarissa Kroll

Organometallische Synthese von Nanopartikeln, Kolloiden und Clustern unter wasserfreien Bedingungen

Prof. Dr. R. A. Fischer

19.12.2014

Pascal Fabie Beese-Vasbender

From Microbially Induced Corrosion to Bioelectrical Energy Conversion - Electrochemical Characterization of Sulfate-Reducing Bacteria and Methanogenic Archaea -

Prof. Dr. M. Stratmann

15.12.2014

Kira Khaletskaya

Functional Metal-Organic Frameworks: From Bulk to Surface Engineered Properties

Prof. Dr. R. A. Fischer

12.12.2014

Sandra Nitsche

Entwicklung und präklinische Testung neuartiger virus-ähnlicher Partikel als Vakzinkandidaten gegen Viren des Respirationstraktes

Prof. Dr. med. K. Überla

12.12.2014

Christian Wiktor

Characterization of Metal-Organic Frameworks and Other Porous Materials via Advanced Transmission Electron Microscopy

Prof. Dr. R. A. Fischer

12.12.2014

Kunpeng Xie

Catalytic Gas-Phase Synthesis and Oxygen Electrocatalysis of Multi-Walled Carbon Nanotubes and Nitrogen-Doped Carbon Nanotubes

Prof. Dr. M. Muhler

12.12.2014

Kenny Alexander Hanke

IR-Spektroskopie von Clustern aus den Bausteinen der ionischen Flüssigkeit $[\text{NC}_{4111}][\text{NTf}_2]$

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

05.12.2014

Sebastian Klimczyk

Sulphoxide-Mediated Umpolung of Alkali Halides and Gold(1)-Catalysed Cyclopropanation of Sulphonium Ylides

Prof. Dr. N. Maulide

05.12.2014

Mario Soorholtz

Entwicklung von festen Katalysatoren für die selektive Oxidation von Methan

Prof. Dr. F. Schüth

05.12.2014

Kerstin Freitag

Molekulare Metallatomarchitektur - Hume-Rothery Phasen inspirierte Molekülchemie

Prof. Dr. R. A. Fischer

04.12.2014

Danish Iqbal

Ultrathin Chemisorbed Polymer Coatings: Corrosion Protection and Nanostructuring of ZnO

Dr. A. Erbe

28.11.2014

Larissa Schwertmann

Heterogene Photokatalyse unter Verwendung von Tantal/Wolfram-basierten Mischoxidkatalysatoren mit Defekt-Pyrochlor-Struktur

Prof. Dr. M. Wark

28.11.2014

Kathrin Stappert

Structure-Property Relationship of Ionic Liquids

Prof. Dr. A.-V. Mudring

28.11.2014

Thomas Niezold

Einfluss einer zielgerichteten Aufnahme von Impfantigenen durch dendritische Zellen auf die Aktivierung von T-Zellen

Prof. Dr. med. K. Überla

27.11.2014

Bianca Hoffmann

Rev-dependent association of cellular proteins with HIV-1 genomic RNA

Prof. Dr. med. K. Überla

25.11.2014

Veronika Matschke

Regulation des Kainatrezeptors GluK2 durch NDRG und SGK1

Prof. Dr. G. Seebohm

4.11.2014

Michael Storcksdieck genannt Bons

Induction and modulation of cellular and humoral immune responses against HIV-1 by immunization with DNA and virus-like particle vaccines

Prof. Dr. med. K. Überla

14.11.2014

Stefan Henkel

Matrix Isolation Study of Azulenylcarbenes

Prof. Dr. W. Sander

13.11.2014

Ly May Chew

Catalytic hydrogenation of CO₂ and CO to short-chain hydrocarbons over iron nanoparticles supported on functionalized carbon nanotubes

Prof. Dr. M. Muhler

31.10.2014

Mariam Fabiola Salazar Rodríguez

Vanadium-free catalysts for the low temperature selective catalytic reduction (SCR) of NO by ammonia

Prof. Dr. W. Grünert

10.10.2014

Hannah Zöllner

Charakterisierung nicht-kodierender RNAs im Pankreaskarzinom

Prof. Dr. St. Hahn

30.09.2014

Carolina Neudeck

Design of Nano-Sized Model Systems for Multi-Functional Materials with Hierarchical Structure

Prof. Dr. F. Schüth

24.09.2014

Annika Korste

Structural characterization of the antiapoptotic protein Bcl-xL and the NDH-1 complex subunit CupS by X-ray crystallography and NMR spectroscopy

Prof. Dr. R. Stoll

29.08.2014

Philipp Bach

Lithiation and Delithiation Mechanisms of Model Anodes for Lithium Ion Batteries Using the Example of Au Thin Films: Correlation of Electrochemical and In-Situ High Energy X-Ray Diffraction Characterization

Prof. Dr. M. Stratmann

27.08.2014

Stephan Schöler

Synthese ortho-funktionalisierter Triarylmethyliliganden

Prof. Dr. G. Dyker

22.08.2014

King Tuo Yip

Struktur- und fragmentbasierte Entwicklung niedrigmolekularer Liganden zur physiologischen Inhibierung des humanen MIA-Proteins

Prof. Dr. R. Stoll

22.08.2014

Zheng Qu

Purification of chemically cross-linked actin oligomers and their interaction with actin binding proteins and myosin heads

Prof. Dr. H. G. Mannherz

25.07.2014

Ping Wang

Design and fabrication of niobate and tantalate semiconductor-based photocatalysts for solar energy conversion and environmental remediation

Prof. Dr. M. Wark

24.07.2014

Eugen Edengeiser

Konfokale Raman-Mikrospektroskopie zur Untersuchung plasmabehandelter DNA und einzelner, lebender humaner Spermatozoen unter physiologieähnlichen Bedingungen

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

22.07.2014

Alberto Battistel

Development of the intermodulated differential immittance spectroscopy for electrochemical analysis

Dr. F. La Mantia

18.07.2014

Tuba Güden-Silber

Entwicklung fluormarkierter Lanthanoid-Cryptate Neuartige paramagnetische Sonden für die Magnetresonanztomografie

Dr. M. Seitz

18.07.2014

Christian Wagner

Aminosäure-Steroid-Konjugate - Wege zu linearen Cholansäure-Peptiden und katalytisches Potential

Prof. Dr. M. Feigel

18.07.2014

Anqi Zhao

Surface and bulk modification of carbon nanotubes for electrochemical energy conversion and storage

Prof. Dr. M. Muhler

18.07.2014

Nagendra Babu Srinivasan

MOCVD of Metal nitride thin films: Deposition, Film Characteristics, Functional properties

Prof. Dr. R. A. Fischer

15.07.2014

Benjamin Helmich

Paarspezifische natürliche Orbitale zur effizienten Berechnung von Coupled-Cluster-Anregungsenergien

Prof. Dr. C. Hättig

11.07.2014

Patrick Maximilian Guidato

Untersuchung der immunmodulatorischen Effekte von Arabinogalaktanen aus Callus Gewebekulturen in vivo und in vitro

Prof. Dr. med. Albrecht Bufe

27.06.2014

SaschaHeikens

Darstellung und Charakterisierung edelmetalldotierter La,Fe,Co-Perowskite als selbstregenerierende Katalysatoren in der Dreiwegekatalse

Prof. Dr. W. Grünert

27.06.2014

Sandra Müller

Matrixisolationsexperimente an Modellpeptiden (N-Methylformamid und Acetamidoaceton) bzw. einer Aminosäurevorstufe (Dicyan) und am Herbizid Chlorpropham

Prof. Dr. W. Sander

23.06.2014

Daniel Habig

Infrarotspektroskopische Untersuchung des Allylradikals und seiner Aggregate in Heliumnanotröpfchen

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

20.06.2014

Porntip Seema

DFT Studies on the Structural and Nanomechanical Properties of Thiolate-Metal Interfaces

Prof. Dr. D. Marx

06.06.2014

Anna Katharina Schuppert

Combinatorial Screening of Fuel Cell Catalysts for the Oxygen Reduction Reaction

Prof. Dr. M. Stratmann

19.05.2014

Jessica Dielmann-Geßner

The Role of Water in Ligand Binding: A Terahertz Absorption Spectroscopy Study

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

16.05.2014

Christopher Joseph Pollock

Development of K β X-ray Emission Spectroscopy as a Probe of Chemical and Biological Catalysis

Prof. Dr. N. Metzler-Nolte

29.04.2014

Olesia Kozachuk

Advanced Functional Materials based on Metal-Organic Frameworks

Elaboration of Redox-Active & Mixed-Component "Defect Engineered" MOFs

Prof. Dr. R. A. Fischer

16.04.2014

Stefanie Katharina Punsmann

Charakterisierung von Bioaerosolen aus Räumen mit Feuchteschäden anhand ihrer pyrogenen Aktivität

Prof. Dr. Monika Raulf

31.03.2014

Sun JaKim

MOCVD of TiO₂ Thin Films from Ti Alkoxide and Amide Based Precursors for Photoelectrochemical Applications

Prof. Dr. R. A. Fischer

27.03.2014

Michael Krasnopolski

Metalorganic Chemical Vapor Deposition (MOCVD) Routes for Fabrication of Rare Earth Nitride Thin Films: Precursor Evaluation, Thin Film Deposition and Characterization

Prof. Dr. R. A. Fischer

20.03.2014

Vanessa Gwildies

Gaining energy from sunlight: Photoelectrochemical water splitting of nitrogen-doped tungsten oxide thin films fabricated by MOCVD using a new W precursor

Prof. Dr. R. A. Fischer

07.03.2014

Arik Benjamin Puls

From Metal Rich Molecules to Novel Intermetallic Clusters - A New Synthesis Concept for Metal Doped Gold Clusters

Prof. Dr. R. A. Fischer

07.03.2014

Angel Topalov

Design and implementation of an automated electrochemical flow system coupled with mass spectrometry for investigation of the dissolution behavior of platinum

Prof. Dr. M. Stratmann

04.03.2014

Inga Ellmers

Selektive katalytische Reduktion von NOX durch NH₃ an Fe-Zeolithen: Neue Erkenntnisse zu aktiven Zentren und Reaktionsmechanismen

Prof. Dr. W. Grünert

28.02.2014

Alexander Neuhaus

Untersuchung und technische Nutzung der Interaktion zwischen Tubulin und dem peroxisomalen Biogenesefaktor PEX14

Prof. Dr. R. Erdmann

21.02.2014

Sebastian Weibels

Einfluß ionischer Flüssigkeiten auf Proteine

Prof. Dr. H. Weingärtner

07.02.2014

Mariusz Molon

Metallatomreiche Koordinationsverbindungen und Cluster: Synthese, Charakterisierung und Funktionalisierung

Prof. Dr. R. A. Fischer

31.01.2014

Michał Błędowski

Visible light-driven photooxidation of water at hybrid photoanodes

Jun.-Prof. Dr. R. Beránek

10.01.2014

Kai Bernd Richter

Eigenschaften funktioneller Übergangsmetall-Nanopartikel hergestellt durch physikalische Dampfabscheidung in ionischen Flüssigkeiten

Prof. Dr. A.-V. Mudring

10.01.2014