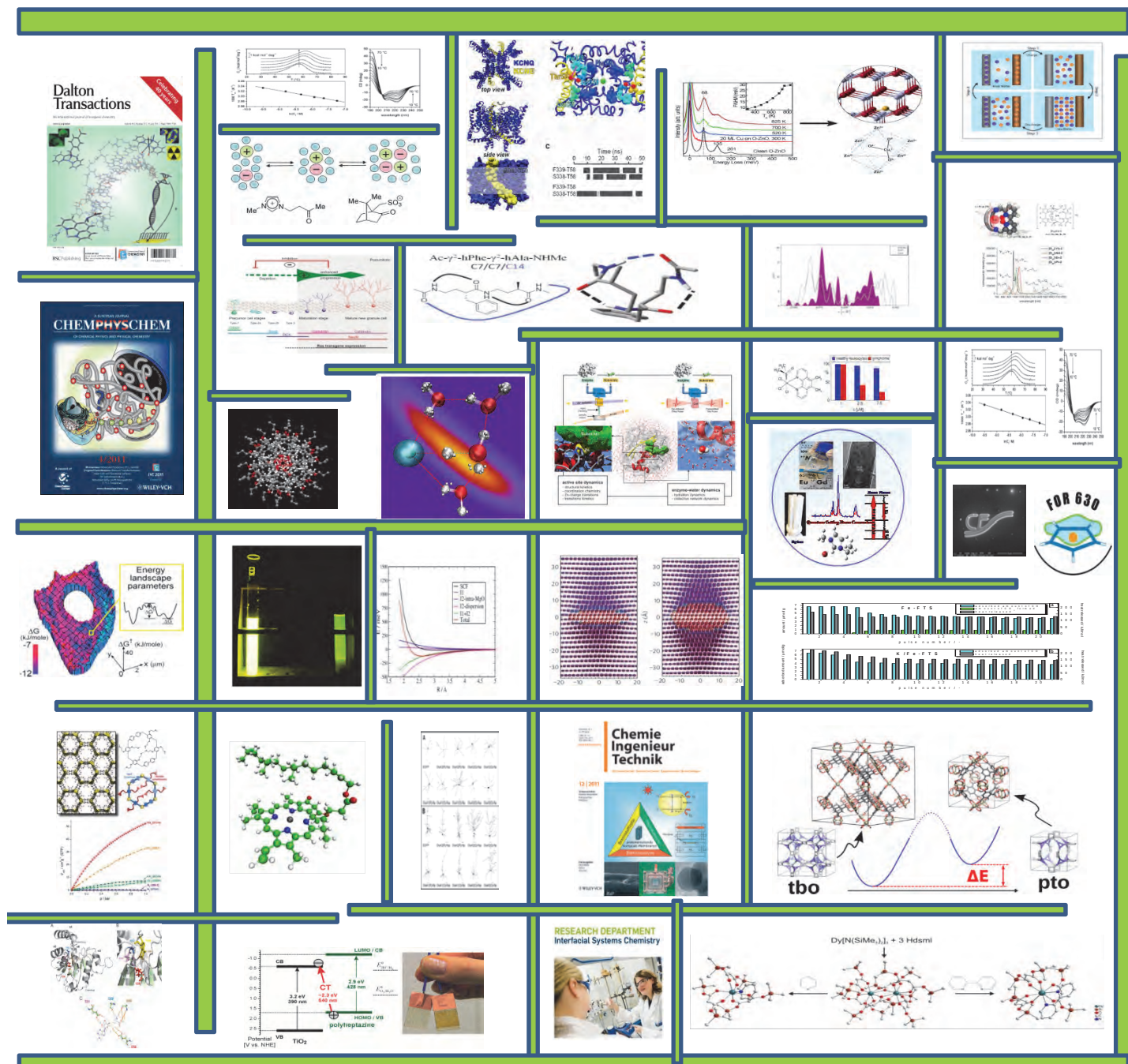


Ruhr-Universität Bochum

Fakultät für Chemie und Biochemie

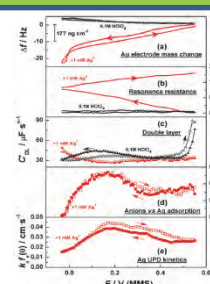
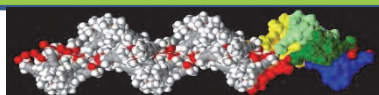
Forschung 2011



Research 2011

Faculty of Chemistry

Ruhr-Universität Bochum



Einleitung/Preface

Wie jedes Jahr soll auch dieser Jahresbericht wieder einen kurzen Eindruck über die Vielfältigkeit der Forschung in der Fakultät für Chemie und Biochemie der Ruhr-Universität Bochum vermitteln. Wenn Sie zu den einzelnen Themen weitere Informationen wünschen, können Sie unter den angegebenen Adressen der Homepages der Arbeitsgruppen oder über die Homepage der Fakultät (<http://www.chemie.rub.de/>) vertiefte Einblicke erhalten.

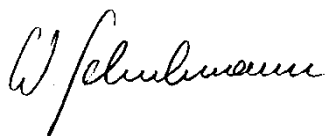
Again this yearly report of the faculty of chemistry and biochemistry of the Ruhr-Universität Bochum is supposed to provide a flavor about the diversity of the research topics. If you need additional information to individual research topics, you are welcome to contact the research groups directly following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

Auch 2011 und insbesondere auch zu Beginn des Jahres 2012 hat sich wie immer sehr viel getan in der Fakultät, so dass ich sie nur mit einigen Links zu der entsprechenden Information leiten möchte:

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

- <http://www.ruhr-uni-bochum.de/solvation/>
- <http://www.ruhr-uni-bochum.de/zemos/>
- <http://www.rd.ruhr-uni-bochum.de/ifsc/>
- <http://www.sfb558.de/>
- <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ces/>
- <http://www.ruhr-uni-bochum.de/acc/terahertz/>
- <http://www.chemie.ruhr-uni-bochum.de/gscb/>

Bochum, October 2012



(Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann)

Beispiele aus der Forschung

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 1

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

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2

Prof. Dr. Roland Fischer (Organometallics & Materials)	7
Prof. Dr. Anjana Devi (Chemie anorganischer Materialien)	8
PD Dr. Rochus Schmid	9
JP Dr. Radim Beranek	10

Lehrstuhl für Organische Chemie 2

Prof. Dr. Wolfram Sander	11
Prof. Dr. Gerald Dyker (Metallorganische Synthesechemie)	12

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1

Prof. Dr. Christian Herrmann (Protein-Interaktionen)	13
--	----

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 2

Prof. Dr. Martina Havenith-Newen	14
JP Dr. Simon Ebbinghaus	15
Dr. Christian Müller	16
Prof. Dr. Hermann Weingärtner	17

Lehrstuhl für Analytische Chemie

Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann	18
Prof. Dr. William Sheldrick	19
Dr. Dirk Wolters	20
Dr. Fabio La Mantia	21
Dr. Aliaksandr Bandarenka	22

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Dominik Marx	23
Dr. Jörg Behler	24
Prof. Dr. Christof Hättig	25
Prof. Dr. Werner Kutzelnigg	26
Prof. Dr. Volker Staemmler	27
PD Dr. Robert Franke	28

Lehrstuhl für Technische Chemie

Prof. Dr. Martin Muhler	29
Prof. Dr. Wolfgang Grünert (Struktur/Reaktivität heterogener Katalysatoren)	30
Prof. Dr. Michael Wark	31
Dr. Yuemin Wang	32
Dr. Jennifer Strunk	33

Lehrstuhl für Biochemie 1

Prof. Dr. Michael Hollmann (Rezeptorbiochemie)	34
Prof. Dr. Guiscard Seeböhm	35

Lehrstuhl für Biochemie 2

Prof. Dr. Rolf Heumann (Molekulare Neurobiochemie)	36
Prof. Dr. Raphael Stoll	37

Lehrstuhl für Didaktik der Chemie

Prof. Dr. Katrin Sommer	38
-------------------------------	----

Forscherguppe 630	39
Zentrum für Elektrochemie (CES)	40
Research Department Interfacial Systems Chemistry (RD IFSC)	41
ZEMOS	42

Veröffentlichungen 2011

Anorganische Chemie 1	43
Anorganische Chemie 2	46
Organische Chemie 2	50
Physikalische Chemie 1	50
Physikalische Chemie 2	50
Analytische Chemie	52
Theoretische Chemie	55
Technische Chemie	58
Biochemie 1.....	62
Biochemie 2.....	63
Didaktik der Chemie	63

Promotionen 2011	65
-------------------------------	-----------

Nils Metzler-Nolte

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

G. Gasser, A. M. Sosniak, N. Metzler-Nolte, *Dalton Trans.* **40** (2011) 7061 – 7076.
Metal-containing peptide nucleic acid conjugates

Peptid-Nukleinsäuren sind DNA-Analoga mit vielversprechenden Eigenschaften für biologische und biomedizinische Anwendungen. Obwohl ihre Entdeckung schon 20 Jahre zurückliegt ist seit kurzem wieder ein gesteigertes Interesse an PNA wahrzunehmen. In diesem Perspective Article wird die Darstellung und Verwendung von PNA Monomeren und

Oligomeren mit kovalent gebunden Metallkomplexen zum ersten Mal zusammenfassend dargestellt. Derartige Metallkonjugate von PNA finden in einer Reihe von Feldern Anwendung, z.B. für die sequenzspezifische Detektion von Nukleinsäure-Monomeren und -Oligomeren, bei der sequenzspezifischen Hydrolyse von Nukleinsäuren oder Peptiden, als radioaktive Tracer, als Modulatoren für die Stabilität von PNA•DNA Hybriden, sowie schließlich als *molecular probes* in der Molekular- und Zellbiologie. Der Erstautor, Gilles Gasser, wurde in Bochum durch ein Stipendium der Alexander-von-Humboldt-Stiftung gefördert und hat jetzt eine Förderprofessur des Schweizer Nationalfonds an der Universität Zürich inne.



Peptide Nucleic Acids (PNAs) are non-natural DNA/RNA analogues with favourable physico-chemical properties and promising applications. Discovered nearly 20 years ago, PNAs have recently re-gained quite a lot of attention. In this Perspective article, advances on the preparation and utilisation of PNA monomers and oligomers containing metal complexes are summarized for the first time. These metal-conjugates have found applications in various research fields such as in the sequence-specific detection of nucleic acids, in the hydrolysis of nucleic acids and peptides, as radioactive probes or as modulators of PNA•DNA hybrid stability, and last but not least as probes for molecular and cell biology. The first author, Gilles Gasser was supported by a fellowship from the Alexander-von-Humboldt Foundation and is now Professor at the University of Zurich.

Anja-Verena Mudring

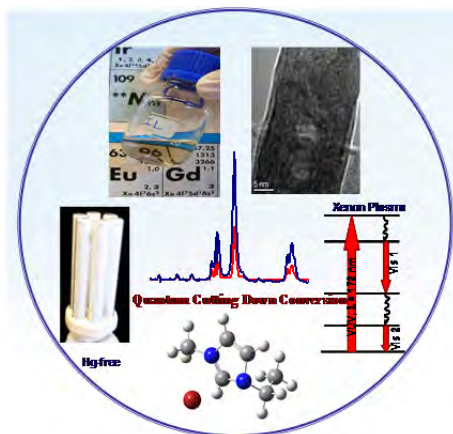
Anorganische Chemie I – Festkörperchemie und Materialien;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-32 27408; FAX: ++49-(0)234-3214951

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

P. Ghosh, S. Tang, A.-V. Mudring, *J. Mat. Chem.* **21** (2011) 8640. Efficient quantum cutting in hexagonal NaGdF₄:Eu³⁺ nanorods (HOT Article)



Die Entwicklung von energiesparenden Leutmitteln ist immer wichtiger, wenn man bedenkt, dass etwa 19% der weltweit generierten elektrischen Energie zu Beleuchtungszwecken verwendet wird. Dies ist mehr als Wasser- und Kernkraftwerke produzieren. Traditionelle Glühbirnen sind wenig effizient, da der größte Teil der elektrischen Energie in Wärme und nicht in Licht verwandelt wird. Aus diesen Gründen werden nun mehr und mehr energieeffizientere Leuchtmittel wie LEDs (light emitting diodes) oder Energiesparlampen (compact fluorescent lamps, CFLs) eingesetzt. Derzeit am populärsten sind Energiesparlampen. Allerdings enthal-

ten diese wie alle Leuchtstofflampen Quecksilber, welches Sicherheits- und Umweltprobleme mit sich bringt. Eine mögliche, umweltfreundlichere Alternative wäre es, Quecksilber in den Energiesparlampen durch ein Edelgas wie Xenon zu ersetzen. Allerdings ist die Effizienz einer solchen Lampe geringer, da zum einen die Xenon-Entladung weniger effizient als die Quecksilber-Entladung ist und zum anderen noch kürzerwelliges UV-Licht in sichtbares Licht umgewandelt wird, was einen höheren Energieverlust bedeutet. Aus diesen Gründen müssen für eine Quecksilber-freie Technologie Leuchtstoffe mit einer Quantenausbeute von mehr als 100% auf der Nanoskala entwickelt werden. Dies gelingt in einer einfachen Reaktion in Wasser bei der Ionische Flüssigkeiten als Additive zugesetzt werden. So lässt sich aus einfachen Startmaterialien ein Leuchtstoff, hexagonales NaGdF₄:Eu³⁺, mit einer Quantenausbeute von 187 % erhalten.

Energy efficient lighting is the need of the hour as nearly nineteen percent of global electricity generation is consumed for lighting – which is more than produced by hydro or nuclear stations and about the same that is produced from natural gas. Incandescent lamps, which are so far widely used, suffer from a poor luminous efficiency as most of the energy is converted to heat, and are replaced more and more by environmentally benign light sources such as light emitting diodes (LEDs) and compact fluorescent lamps (CFLs). Especially CFLs are extensively used as they consume less energy and have a longer rated life. But like all fluorescent lamps, CFLs also contain mercury which complicates their disposal and adds substantial health risks and environmental issues during manufacturing. A possible alternative in which Hg is replaced by an environmentally safe noble gas like Xe, has several advantages like immediate start, essential for special applications like lamps in facsimile, copying machines and car brake lights. However, the discharge efficiency of Xe is less compared to Hg. In addition, conversion of the yet shorter wavelength radiation to visible light results in an even larger energy loss compared to Hg based CFLs. In order to make Xe based CFLs competitive, a quantum yield of the used phosphor larger than 100% needs to be achieved. An ionic liquid (IL) assisted solvothermal method was developed that allowed to manufacture single phase, oxygen free, hexagonal NaGdF₄:Eu³⁺ nanorods with a visible quantum efficiency of 187 %.

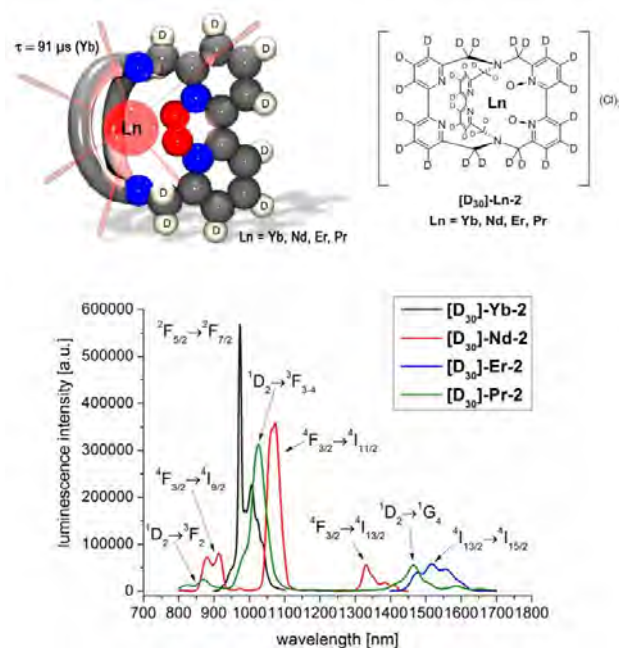
Michael Seitz

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

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

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

C. Doffek, N. Alzakhem, M. Molon, M. Seitz, *Inorg. Chem.* **51** (2012) 4539-4545. Rigid, Perdeuterated Lanthanoid Cryptates – Extraordinarily Bright Near-IR Luminophores



Die Lanthanoide Ytterbium, Neodym, Praseodym und Erbium zeigen Photolumineszenz im Spektralbereich von ca. 800-1700 nm und sind aufgrund dieser Eigenschaft von einigem Interesse für eine Vielzahl von technologischen Anwendungen, z.B. für die optische Telekommunikation oder das Lumineszenz-Imaging im biomedizinischen Bereich. Die Lumineszenzeffizienz ist jedoch häufig gering, v.a. durch das Vorhandensein von multiphonon-induzierten Deaktivierungsmechanismen. Dabei spielen hochfrequente Oszillatoren wie z.B. C-H eine dominierende Rolle. Deren negative Auswirkungen können durch den Ersatz von C-H- durch C-D-Einheiten stark abgeschwächt werden, was sich in der Regel deutlich positiv auf die Emissionsintensität auswirkt. Die neu entwickelten

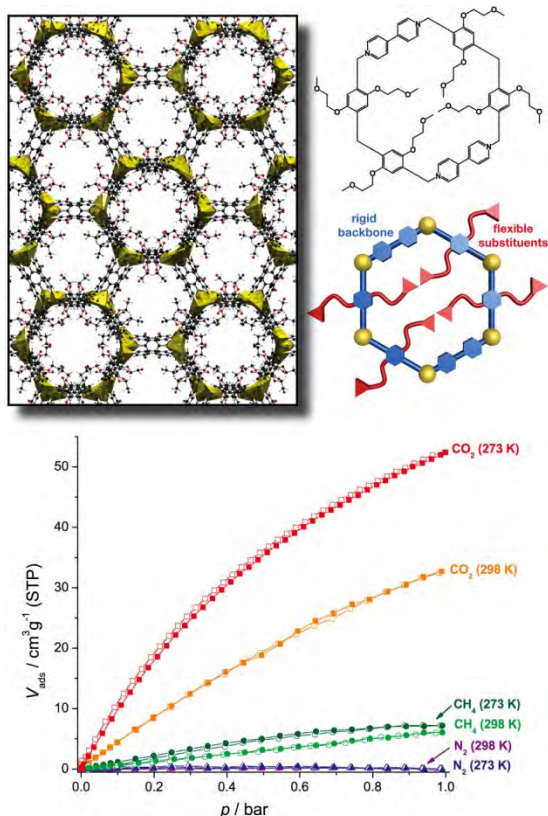
Lanthanoid-Cryptate **[D₃₀]-Ln-2** mit den Lanthanoiden Yb, Nd, Er und Pr (siehe Abbildung) können sehr leicht in perdeuterierter Form hergestellt werden und zeigen außerordentlich intensive Lumineszenz. Der Ytterbium-Cryptat **[D₃₀]-Yb-2** ist besonders effizient und besitzt enorm lange Lumineszenz-Abklingzeiten bis zu $\tau = 91 \mu\text{s}$. Damit ist er in etwa doppelt so effektiv wie die meisten bisher bekannten Ytterbium-Luminophore. Zudem zeigen diese Cryptate außergewöhnlich hohe Komplexstabilitäten in Lösung.

The lanthanoids ytterbium, neodymium, praseodymium, and erbium luminesce in the spectral range of ca. 800-1700 nm. This property makes them of considerable interest for a variety of technological applications, e.g. for optical telecommunication or for biomedical luminescence imaging. The luminescence efficiency, however, is often low, especially due to the presence of multiphonon-induced deactivation mechanisms, where high-frequency oscillators like C-H play a dominant role. Their negative influence can be mitigated by substitution of C-H for C-D units, which usually has a very positive effect on the emission intensity. The newly developed lanthanoid cryptates **[D₃₀]-Ln-2** with the lanthanoids Yb, Nd, Er, and Pr (siehe figure) can be synthesized easily in perdeuterated form and show extraordinarily intense luminescence. The ytterbium cryptate **[D₃₀]-Yb-2** is especially efficient and possesses enormously long luminescence lifetimes of up to $\tau = 91 \mu\text{s}$. It is approximately twice as efficient as most of the previously known ytterbium luminophores. In addition, these cryptates show extraordinarily high complex stabilities in solution.

Roland A. Fischer

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

S. Henke, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011) 2064–2067. Gated Channels in a Honeycomb-like Zinc–Dicarboxylate–Bipyridine Framework with Flexible Alkyl Ether Side Chains



Metallorganische Netzwerke (Metal-Organic Frameworks, MOFs) stellen eine modulare und vielfältig modifizierbare Klasse moderner Hybridmaterialien mit außergewöhnlich großer Porosität dar. MOFs der $[\text{M}_2\text{L}_2\text{P}]_n$ ($\text{M} = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$; L = linearer Dicarboxylat-Linker; P = neutraler Pillar) Familie sind in den letzten Jahren vielfach untersucht worden. Alle bekannten $[\text{M}_2\text{L}_2\text{P}]_n$ Derivate kristallisieren entweder in einer tetragonalen oder einer Kagome Topologie. Uns gelang die Synthese eines neuen Derivates der Zusammensetzung $[\text{Zn}_2(\text{BME-bdc})_2(\text{bipy})]_n$ (BME-bdc = 2,5-Bis(2-methoxyethoxy)-1,4-benzoldicarboxylat; bipy = 4,4'-Bipyridin) welches in einer Honigwaben-ähnlichen Topologie mit eindimensionalen, zylindrischen Kanälen kristallisiert. Der Schlüssel für die Ausbildung der Honigwaben-ähnlichen Topologie ist die konformative Freiheit des disubstituierten Linkers, die ein Verdrehen der Carboxylat-Gruppen aus der Ebene des zentralen Phenylrings ermöglicht. Die flexiblen 2-Methoxyethoxy-Seitenketten des BME-bdc Linkers fungieren als “molekulare Türen” für Gastmoleküle und bilden eine polare Porenoberfläche aus, wodurch das poröse Netzwerk eine außergewöhnlich hohe Selektivität bei der Adsorption von CO_2 gegenüber N_2 oder CH_4 aufweist. Unsere Ergebnisse unterstreichen das große Potential der gezielten Linker-Modifikation für die Entwicklung neuer, hoch effizienter Adsorbentien für Gasseparation und Sensorik.

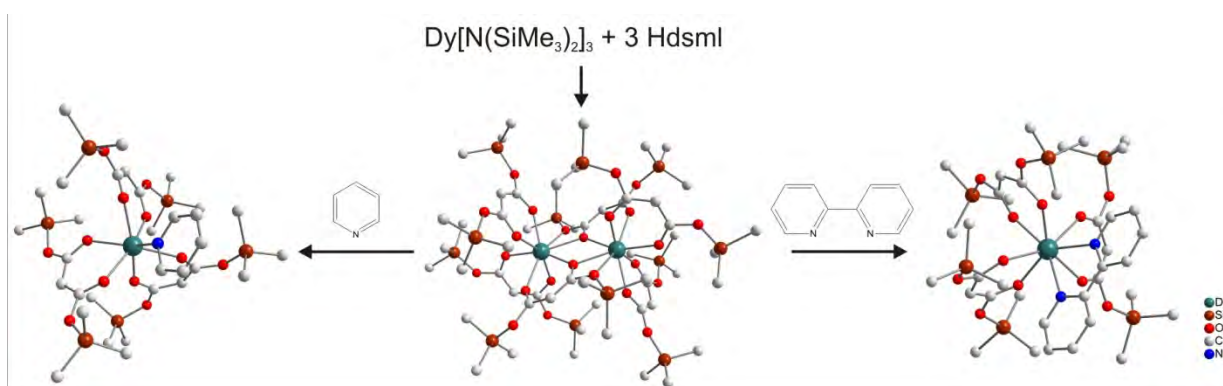
Metal-Organic Frameworks (MOFs) represent a modular and highly tunable class of hybrid materials exhibiting extraordinary porosity. The $[\text{M}_2\text{L}_2\text{P}]_n$ ($\text{M} = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$; L = linear dicarboxylate linker; P = neutral pillar) MOF family has been extensively studied in recent years. All known $[\text{M}_2\text{L}_2\text{P}]_n$ derivatives exhibit either a tetragonal or a Kagome-type topology. We have successfully synthesized a novel derivative of the composition $[\text{Zn}_2(\text{BME-bdc})_2(\text{bipy})]_n$ (BME-bdc = 2,5-bis(2-methoxyethoxy)-1,4-benzenedicarboxylate; bipy = 4,4'-bipyridine) which crystallizes in an unexpected honeycomb-like topology with one-dimensional cylindrical channels. The key for the construction of the honeycomb-like topology is the disubstitution of the dicarboxylate linker, which has a major impact on the conformational freedom of the carboxylate groups. The flexible 2-methoxyethoxy groups of the BME-bdc linker act as “molecular gates” for incoming guest molecules, yielding in exceptionally high sorption selectivity for CO_2 over N_2 and CH_4 . Our results underline the huge potential of targeted linker modification for the development of highly efficient adsorbents for gas separation and sensing.

Anjana Devi

Inorganic Materials Chemistry - Anorganische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum; Tel.: ++49-(0)234-3224150; FAX: ++49-(0)234-3214174
email: anjana.devi@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/aci2/devi>

A. P. Milanov, R. W. Seidel, D. Barreca, A. Gasparotto, M. Winter, J. Feydt, S. Irsen, H.-W. Becker, A. Devi, *Dalton Trans.*, **40** (2011) 62-78. Malonate complexes of dysprosium: synthesis, characterization and application for LI-MOCVD of dysprosium containing thin films

Eine Serie von Dysprosium-Malonat-Verbindungen wurde synthetisiert. Der sterische Anspruch der verwendeten Dialkyl-Malonat-Liganden wurde systematisch variiert und der Einfluss auf die physikalischen und chemischen Eigenschaften hinsichtlich des Einsatzes in der MOCVD untersucht. Mittels Einkristall-Röntgenstrukturanalyse wurde gezeigt, dass die homoleptischen tris-malonato Dy Komplexe als achtfach koordinierte Dimere in einer verzerrten, zweifach quadratisch Flächen-überkappten trigonal-prismatischen Geometrie vorliegen. Um nun mehrkernige Komplexe zu vermeiden und die Löslichkeit der Verbindung in diversen Lösemitteln zu erhöhen, wurden den Verbindungen Lewis Basen wie 2,2'-Bipyridin und Pyridin zugesetzt. Auf diese Weise wurden monomere tris-malonato mono Lewis Basen Addukte mit verbesserten thermischen Eigenschaften erhalten. Schließlich wurde der Silylmalonat-Addukt-Komplex $[\text{Dy}(\text{dsml})_3\text{bipy}]$ erfolgreich als Single-Source-Precursor (SSP) in der flüssig-Injektions MOCVD (liquid injection MOCVD, LI-MOCVD) für das Wachstum von DySi_xO_y Dünnschichten eingesetzt.



A series of malonate complexes of dysprosium were synthesized. The steric bulkiness of the dialkylmalonato ligand employed was systematically varied and its influence on the resulting structural and physico-chemical properties that is relevant for metalorganic chemical vapor deposition (MOCVD) was studied. X-ray diffraction analysis revealed that the homoleptic *tris*-malonato Dy complexes are dimers with distorted square-face bicapped trigonal-prismatic geometry and a coordination number of eight. In an attempt to decrease the nuclearity and increase the solubility of the complexes in various solvents, the focus was to react these dimeric complexes with Lewis bases such as 2,2'-biypridyl and pyridine. This resulted in monomeric *tris*-malonato *mono* Lewis base adduct complexes with improved thermal properties. Finally the silylmalonate adduct complex $[\text{Dy}(\text{dsml})_3\text{bipy}]$ was successfully employed as a single source precursor (SSP) for growing DySi_xO_y thin films by liquid injection MOCVD process.

Rochus Schmid

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2; AG Computational Materials Chemistry;

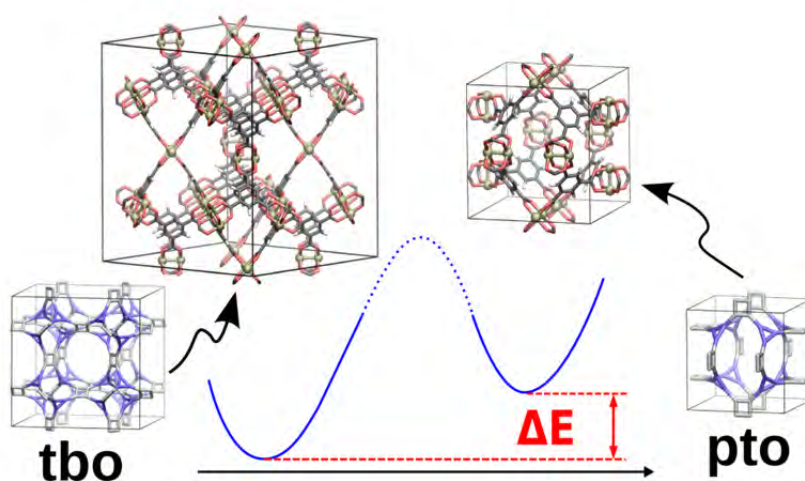
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

S. Amirjalayer, M. Tafipolsky, R. Schmid, *J. Phys. Chem. C* **115** (2011) 15133-15139. Exploring network topologies of copper paddle wheel based metal-organic frameworks with a first-principles derived force field

Poröse Koordinationspolymere, wie das Kupfer-Dimer basierte HKUST-1, sind neuartige funktionelle Materialien mit einem hohen Potential für Gasspeicherung und -Trennung, Sensorik, sowie in der Katalyse. Jedoch sind prinzipiell meist eine Reihe supramolekularer Strukturisomere möglich, wogegen experimentell nur eine kristalline Phase erhalten wird. Unter Verwendung unseres kürzlich entwickelten ab-initio parameterisierten Kraftfeldes für derartige Systeme, welches auch Deformationsenergien genau zu berechnen in der Lage ist, haben wir erstmals die relative Stabilität von isomeren Strukturen eines metallorganischen Netzwerkes vorhergesagt. Wir fanden, daß HKUST-1 die **tbo** Netzwerktopologie bevorzugt, wie das auch im Experiment beobachtet wird, und konnten auch erklären warum das so ist. Zudem wird für einen verlängerten Verbinder die Situation invertiert und die **pto** Struktur gebildet, so wie das bei der Synthese des sogenannten MOF-14 der Fall ist. Unser Ansatz ist der erste Schritt in Richtung einer theoretischen Strukturvorhersage solcher hybriden Materialien.



Porous coordination polymers, like the copper dimer based HKUST-1, are novel functional materials with potential in gas storage and separation, sensing and catalysis. However, often a number of supramolecular isomeric structures are possible in principle, whereas experimentally only a single crystal phase can be synthesized. Using our recently developed first-principles derived force field for such systems, which accurately computes energies for network deformations, we have for the first time predicted the relative stability of possible isomeric structures for a metal-organic framework. We found HKUST-1 to prefer the **tbo** network topology, as it is observed experimentally, and could explain why this is the case. Furthermore, with an enlarged organic linker, the situation is reversed and the **pto** structure is formed, as it is found synthetically for the so called MOF-14. Our method is a first step towards the theoretical structure prediction of such hybrid materials.

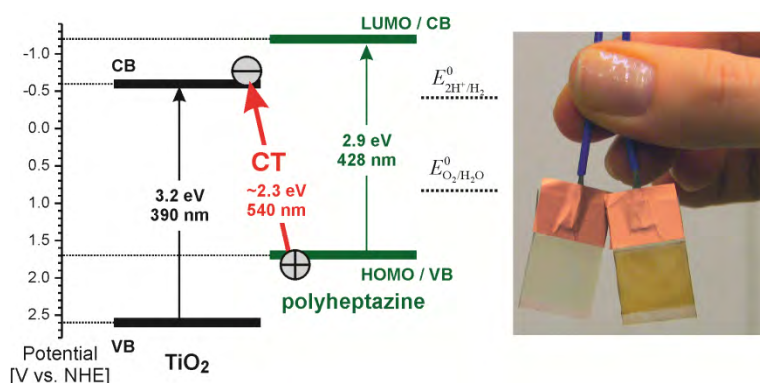
Radim Beránek

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

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

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

M. Bledowski, L. Wang, A. Ramakrishnan, O.V. Khavryuchenko, V.D. Khavryuchenko, P.C. Ricci, J. Strunk, T. Cremer, C. Kolbeck, R. Beranek, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** (2011) 21511-21519. Visible-light photocurrent response of TiO₂-polyheptazine hybrids: evidence for interfacial charge-transfer absorption



Die Entwicklung von Elektroden für photoelektrochemische Spaltung von Wasser in Wasserstoff und Sauerstoff ist eine große Herausforderung in der chemischen Umwandlung von Sonnenenergie. Wir untersuchten Photoelektroden, die auf Titandioxid-Polyheptazin-Hybridmaterialien basieren. Aufgrund der hohen Stabilität von sowohl TiO₂ als auch Polyheptazin sind diese Materialien sehr gute Kandidaten für die Herstellung von Photoanoden für Wasserphotooxidation. Wir lieferten zum ersten Mal einen klaren experimentellen Beweis für die Bildung eines interfazialen Charge-Transfer-Komplexes zwischen Polyheptazin (Donor) und TiO₂ (Akzeptor), die für eine signifikante Rotverschiebung der Absorption und der Photostromantwort des Hybrids im Vergleich zu den einzelnen Komponenten verantwortlich ist. Der direkte optische Elektronenübergang vom HOMO von Polyheptazin in das Leitungsband von TiO₂ führt zur Absorption im sichtbaren Bereich (2,3 eV; 540 nm). Das Potenzial der lichtinduzierten Löcher (+1,7 V gegen NHE, pH 7) ermöglicht die Photooxidation von Wasser (+0,82 V gegen NHE, pH 7) durch Bestrahlung mit sichtbarem Licht ($\lambda > 420$ nm), was durch die Entwicklung von Sauerstoff bewiesen werden konnte, nachdem die Hybridelektrode mit IrO₂-Nanopartikeln als Co-Katalysator modifiziert wurde.

The development of photoelectrodes for splitting water into hydrogen and oxygen is one of the major challenges in chemical solar energy conversion. We investigated photoelectrodes based on TiO₂-polyheptazine hybrid materials. Since both TiO₂ and polyheptazine are extremely chemically stable, these materials are highly promising candidates for fabrication of photoanodes for water photooxidation. We provided for the first time clear experimental evidence for formation of an interfacial charge-transfer complex between polyheptazine (donor) and TiO₂ (acceptor), which is responsible for a significant red shift of absorption and photocurrent response of the hybrid as compared to both of the single components. The direct optical charge transfer from the HOMO of polyheptazine to the conduction band of TiO₂ gives rise to an absorption in the visible (2.3 eV; 540 nm). The estimated potential of photogenerated holes (+1.7 V vs. NHE, pH 7) allows for photooxidation of water (+0.82 V vs. NHE, pH 7) as evidenced by visible light-driven ($\lambda > 420$ nm) evolution of dioxygen on hybrid electrodes modified with IrO₂ nanoparticles as a co-catalyst.

Wolfram Sander

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

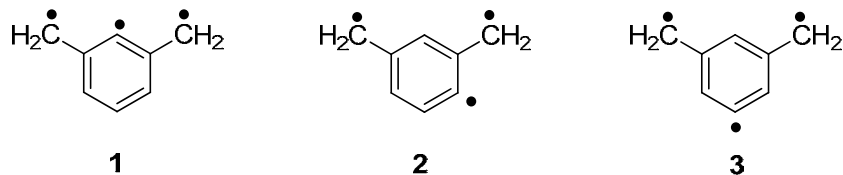
Tel: +49 234 3224593, FAX +49 234 3214353

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

P. Neuhaus, M. Winkler, W. Sander, *J. Phys. Org. Chem.* **24** (2011) 976-992. EPR Spectroscopic and Computational Characterization of the 2-Dehydro-m-xylylene and 4-Dehydro-m-xylylene

Triradikale sind interessante Moleküle, die beispielsweise als Elemente in organischen magnetischen Materialien dienen können. In der Arbeit werden zwei neue Triradikale **1** und **2** vorgestellt, die aufgrund ihrer Spintopologie (Kombination aus einem σ - und zwei π -Radikallzentren) von besonderem Interesse sind.

Die beiden Triradikale **1** und **2** wurden durch Photolyse der entsprechenden Triiod-Verbindungen in Argonmatrizes erzeugt und durch ESR-Spektroskopie charakterisiert. Übereinstimmend mit Multi-Referenz-Rechnungen nehmen beide Systeme einen Quartett-Grundzustand ein, während beim isomeren Triradikal **3** der 2B_2 Dublett-Zustand energetisch unter dem 4B_2 Zustand liegt. Für dieses Triradikal konnte daher unter gleichen experimentellen Bedingungen keines der charakteristischen Quartett-Signale beobachtet werden. Die beste Abschätzung der adiabatischen Dublett-Quartett Energiedifferenz (CAS(7,7)-AQCC/cc-pVTZ//CAS(9,9)-RS2c/cc-pVTZ) bei **1** - **3** ergeben sich zu 10.4, 7.7 bzw. 1.3 kcal/mol. Die gemessenen Nullfeldparameter von **1** und **2** werden in Hinblick auf die Beiträge der carbenoiden Resonanzstrukturen (Spinpolarisation des π -Systems) zum Resonanzhybrid der Triradikale diskutiert.



The isomeric triradicals **1** and **2** were generated by irradiation of the corresponding triiodo compounds in cryogenic argon matrices and characterized by EPR spectroscopy. In agreement with multireference computations, both systems possess quartet ground states, whereas in the isomeric triradical **3** the 2B_2 doublet state lies energetically below the 4B_2 state. Therefore, no characteristic quartet signals could be observed for this triradical under similar experimental conditions. The best estimates for the adiabatic doublet-quartet energy splittings (CAS(7,7)-AQCC/cc-pVTZ//CAS(9,9)-RS2c/cc-pVTZ) of **1** - **3** are 10.4, 7.7, and -1.3 kcal/mol, respectively. The measured zero-field splitting parameters of **1** and **2** are discussed in terms of the contributions of carbenoid resonance structures (spin polarization of the π -system) to the resonance hybrid of the title triradicals.

Gerald Dyker

Org. Chem. - Organische Synthese und Katalyse;

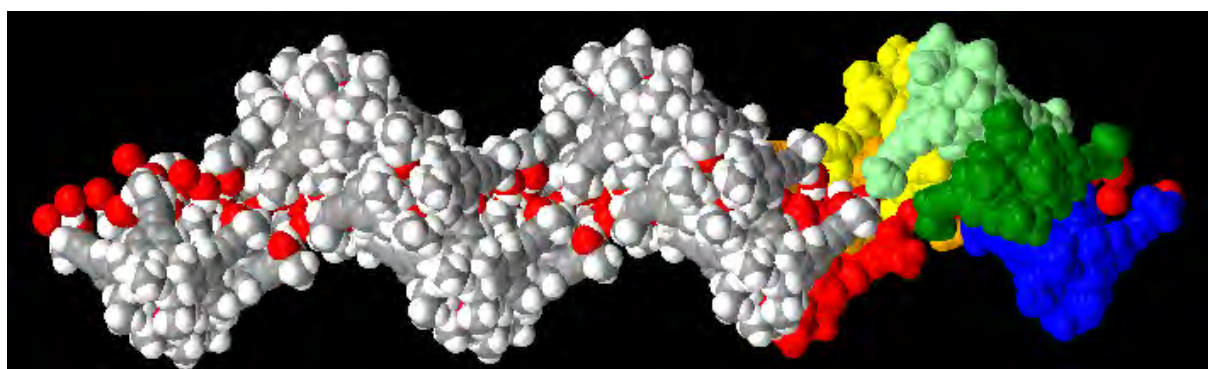
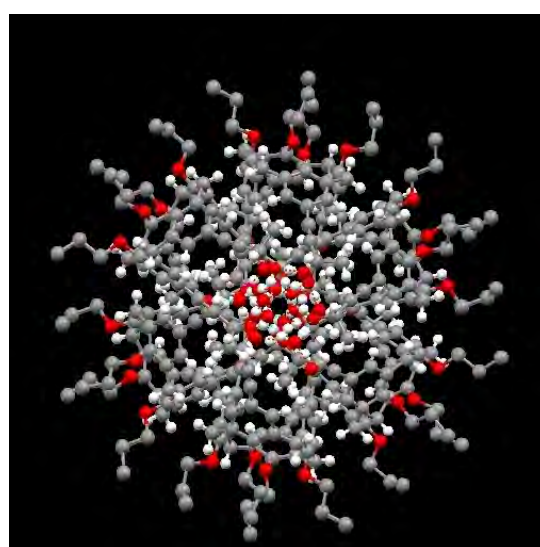
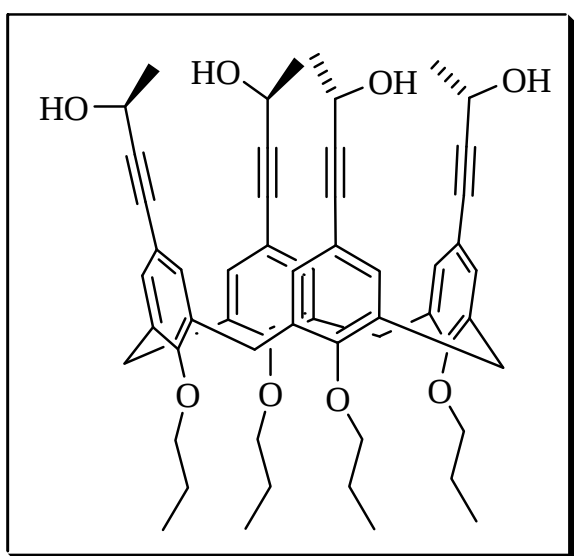
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

M. Mastalerz, H. J. E. Rivera, I. M. Oppel, G. Dyker, *Chryst. Eng. Comm.* **2011**, 13, 3979-3982. Supramolecular single-stranded calix[4]arene helices-towards a crystal engineering approach of homochiral assemblies.

Mehrfach Alkohol-funktionalisierte chirale Calix[4]arene bilden im Kristall über H-Brücken helicale Strukturen mit zentralem hydrophilem Kanal aus. Punktchiralität des Einzelmoleküls bewirkt dabei helicale Homochiralität des supramolekularen Aggregats.



In the crystalline state multifold alcohol-functionalized chiral calix[4]arenes are forming helical structures with central hydrophilic channel, stabilized by hydrogen bridging bonds. Thereby point chirality is translated into helical homochirality.

Christian Herrmann

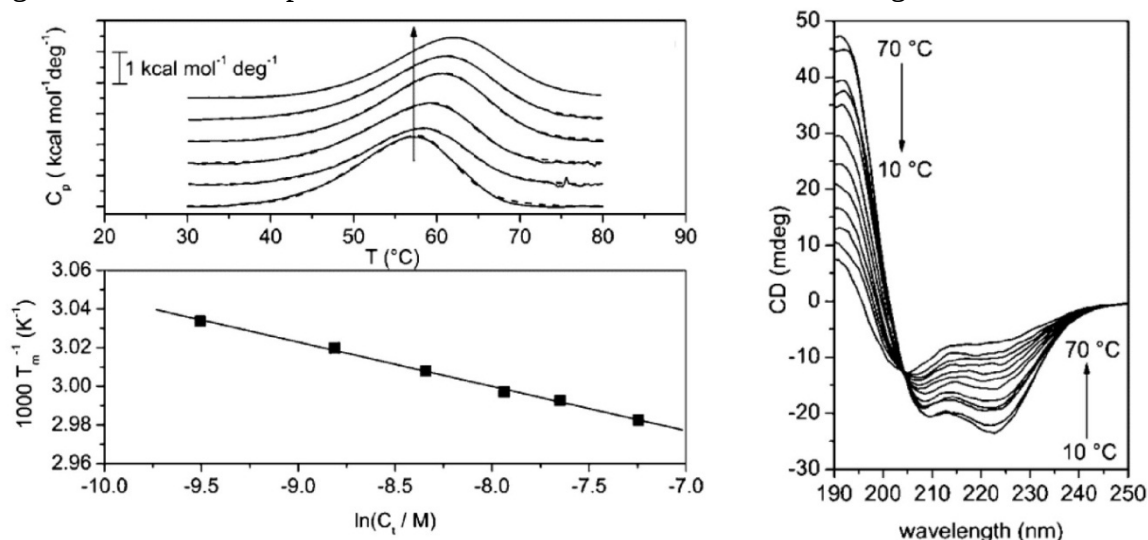
Physikalische Chemie 1; AG Protein-Interaktionen; Ruhr-Uni Bochum; D-44780 Bochum

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

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

D. Constantinescu, C. Makbul, A. Koturenkiene, M. Lüdemann, C. Herrmann, *Biochemistry* **50** (2011) 10990-11000. Dimerization-induced folding of MST1 SARAH and the influence of the intrinsically unstructured inhibitory domain: low thermodynamic stability of monomer.

Die Serine/Threonin spezifische Kinase (MST1) spielt eine Rolle bei der Aktivierung des Zelltodprogramms (Apoptose). Die C-terminale SARAH Domäne ist verantwortlich für die Dimerisierung und bildet dabei eine antiparallele *coiled-coil* Struktur. Diese Domäne ist essentiell für MST1 Autophosphorylierung und für die Interaktion mit anderen Partnern. Im monomeren Zustand ist SARAH thermodynamisch instabil und die Bildung des Homodimers ist verbunden mit Faltung. Durch DSC (differential scanning calorimetry, Bild links) und CD Spektroskopie (Bild rechts) konnten wir zeigen, dass die SARAH Domäne kooperativ dissoziiert und sich entfaltet – ohne ein stabiles Monomer Intermediat. Die direkt benachbarte inhibitorische Domäne ist sehr flexibel und intrinsisch entfaltet – sowohl im isolierten wie auch im Dimerzustand des MST1 Proteins. Allerdings erhöht die inhibitorische Domäne die thermodynamische Stabilität des SARAH Monomers wie auch die Homodimer Affinität. Die Ergebnisse offenbaren die Bedeutung von Proteinflexibilität und Assoziations-induzierter Faltung eines Proteins für Spezifität, Affinität und für molekulare Schaltungsfunktionen.



The serine/threonine mammalian Sterile 20-like kinase (MST1) is involved in promotion of caspase-dependent and independent apoptosis. The oligomerization domain, denoted as SARAH domain, forms an antiparallel coiled coil dimer and it is important for both, MST1 autophosphorylation and for interactions with other proteins. We show that the monomeric state of SARAH is thermodynamically unstable and that homodimerization is coupled with folding. By investigating the thermal denaturation using differential scanning calorimetry (see figure left) and circular dichroism (see figure right), we have found that the SARAH domain dissociates and unfolds cooperatively, without a stable intermediate monomeric state. The Inhibitory domain is found to be highly flexible and intrinsically unfolded, not only in isolation but also in the dimeric state of the Inhibitory-SARAH construct. More, the Inhibitory domain increases the thermodynamic stability of SARAH monomer and homodimer affinity. These results emphasize the importance of flexibility and binding-induced folding for specificity, affinity and for the capacity to switch from one state to another.

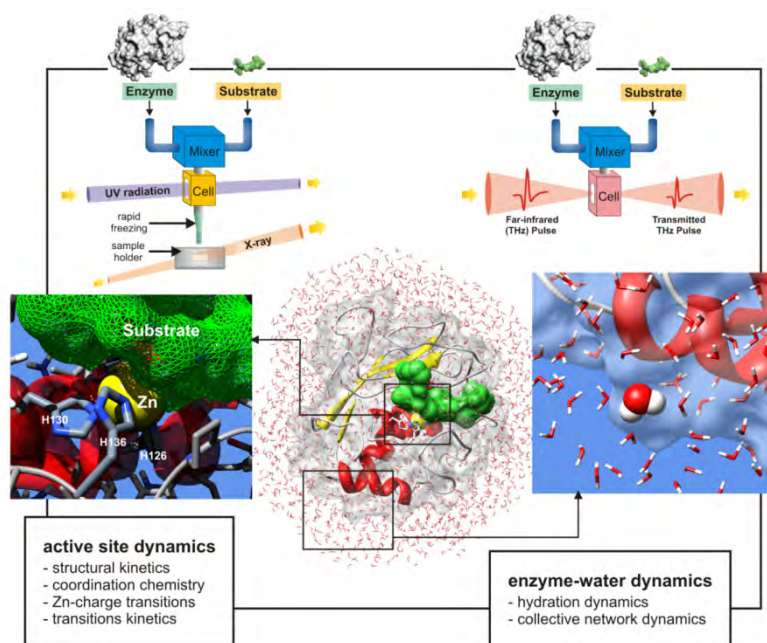
Martina Havenith-Newen

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

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

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

M. Grossmann, B. Born, M. Heyden, D. Tworowski, G.B. Fields, I. Sagi, M. Havenith, *Nature Structural & Molecular Biology* **18**, 1102-1108. Correlated structural kinetics and retarded solvent dynamics at the metalloprotease active site.



Die Wahl des Lösungsmittels spielt eine wichtige Rolle für die Aktivität eines Enzyms. Die quantitative Analyse des gesuchten Effekts ist jedoch schwierig. Hier wurden Terahertz-Spektroskopie und Röntgenabsorptionsmessungen kombiniert, um die Änderungen im Wasser-Proteinnetzwerk während der Peptid-Hydrolyse am aktiven Zentrum des Enzyms, dem Zinkatom, zu bestimmen. Diese Änderungen sind korreliert mit Konformationsänderungen an der Bindungsstelle von Enzym-Substrat-Komplexen. In den

Experimenten konnten wir zeigen, dass während des Andockens (Enzym-Substrat-Bindung) die Bewegung des Wassers verlangsamt wird. Dies zeigt sich am ausgeprägtesten in der Nähe des aktiven Zentrums. Dieser Effekt wurde bei allen untersuchten enzymatisch aktiven Komplexen gefunden, allerdings nicht bei solchen Enzym-Substrat-Verbindungen, in denen das Protein nur mechanisch andockt (Inhibitoren), aber keine enzymatische Funktion initiiert wird. Es liegt damit nahe zu spekulieren, dass Wasser als ‚Pfadfinder‘ eine aktive Rolle bei der Enzymkatalyse spielt.

The choice of solvent is crucial for enzyme activity, but obtaining an accurate, quantitative picture of solvent activity during catalysis is quite challenging. Terahertz spectroscopy and X-ray absorption analyses were combined to measure changes in the coupled water-protein motions during peptide hydrolysis of the active centre, the zinc atom of a human metalloprotease. These changes were found to be directly correlated with rearrangements at the active site during the formation of productive enzyme-substrate intermediates and were found to differ from those in an enzyme-inhibitor complex. Molecular dynamics simulations showed a steep gradient of fast-to-slow coupled protein-water motions around the protein, active site and substrate. The results show that water retardation occurs before formation of the functional Michaelis complex. The observed gradient of coupled protein-water motions may assist enzyme-substrate interactions through water-polarizing mechanisms that are remotely mediated by the catalytic metal ion and the enzyme active site.

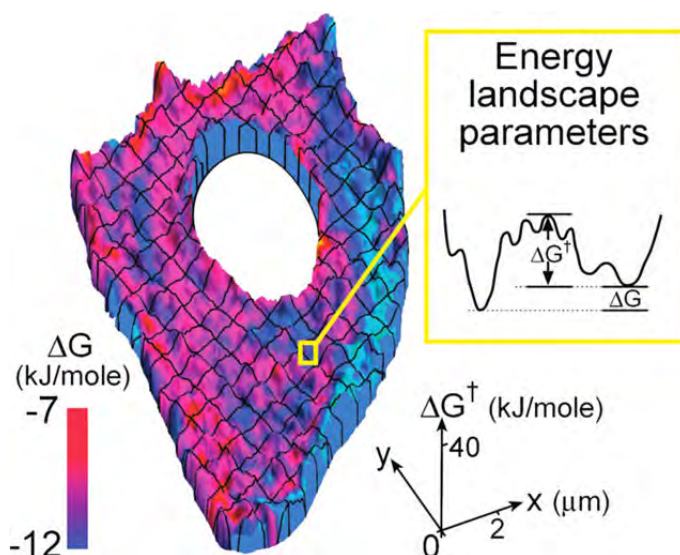
Simon Ebbinghaus

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

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

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

S. Ebbinghaus, M. Gruebele. *J. Phys. Chem. Lett.* **2** (2011) 314-319. Protein Folding Landscapes in the Living Cell



Die Struktur und Funktion von Proteinen wird meist *in vitro* untersucht, z.B. in verdünnter Lösung oder in Kristallform. Durch Kombination einer schnellen Temperatursprungmethode mit Fluoreszenzmikroskopie haben wir eine neue Technik entwickelt (Fast Relaxation Imaging, FReI), mit der biomolekulare Dynamik mit hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung *in vivo* gemessen werden kann. Diese Studie vergleicht mechanistische Unterschiede von Proteinfaltung innerhalb des Cytoplasmas einer Zelle. Die

grundlegenden Schritte der kooperativen Proteinfaltung werden auch in der Zelle beobachtet, allerdings hängt die Stabilität eines Proteins von der lokalen chemischen Umgebung ab. Faltungsstudien *in vitro* in hochkonzentrierten makromolekularen Lösungen helfen die Unterschiede zu quantifizieren und erlauben die Struktur und Dynamik von Proteinen in Zellen besser zu verstehen.

Structure and function of proteins are predominantly investigated *in vitro*, in environments ranging from dilute solution to cryogenic crystals. We developed the temperature-jump fluorescence microscope (Fast Relaxation Imaging, FReI) to spatio-temporally resolve fast biomolecular kinetics and stability inside a single living cell. Our recent study focused on mechanistic details of protein folding across the cytoplasm. We show that the general features of cooperative folding transitions and kinetics remain the same as those *in vitro*, but the folding free-energy landscape and local viscosity vary according to microenvironments in the cellular landscape. Experiments *in vitro* provide a basis for comparing crowding and chemical effects with experiments inside of the cell. Perhaps cells even evolved to post-translationally modulate protein folding and binding through chemical patterns or by crowding.

Christian W. Müller

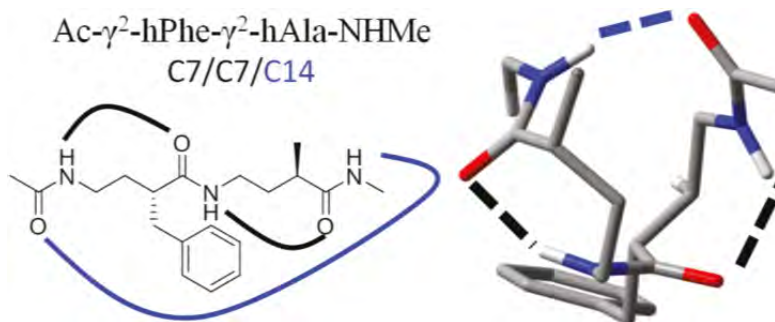
Physikalische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

W. H. James III, E. G. Buchanan, C. W. Müller, J. C. Dean, D. Kosenkov, L. V. Slipchenko, L. Guo, A. G. Reidenbach, S. H. Gellman, T. S. Zwier, *J. Phys. Chem. A* **115** (2011) 13783–13798. Evolution of amide stacking in larger γ -peptides: Triamide H-bonded cycles

Synthetische Foldamere wie z. B. α/β -, β - und γ -Peptide besitzen häufig Sekundärstrukturen, die diejenigen der natürlich vorkommenden α -Peptide ergänzen. γ -Peptide besitzen aufgrund von drei C-Atomen zwischen benachbarten Amid-Gruppen des Peptidgerüsts eine erhöhte



Flexibilität gegenüber α -Peptiden (ein C-Atom) und β -Peptiden (zwei C-Atome). Jüngste Fortschritte bei der Synthese von γ -Aminosäuren gehen folglich einher mit einem erhöhten Interesse an den Konformerstrukturen von synthetischen Peptide, die γ -Aminosäuren enthalten. Die

Konformerstrukturen von zwei kurzen γ -Peptiden, Ac- γ^2 -hPhe- γ^2 -hAla-NHMe und Ac- γ^2 -hAla- γ^2 -hPhe-NHMe, wurden in der vorliegenden Arbeit mittels IR-UV-Doppelresonanzspektroskopie, der sog. Einzelkonformationsspektroskopie, charakterisiert. Die einzelkonformationsspektroskopischen IR-Spektren im NH-Streckschwingungsbereich ($3300\text{--}3500\text{ cm}^{-1}$) zeigen, dass Ac- γ^2 -hPhe- γ^2 -hAla-NHMe vier Konformere, Ac- γ^2 -hAla- γ^2 -hPhe-NHMe hingegen drei Konformere besitzt. Vier Konformere weisen sequentiell H-brückengebundene C9/C9-Doppelringe auf, ein Konformer eine C9/C14 H-Brücken-Bifurkation. Die übrigen zwei Konformere sind durch einen außergewöhnlichen C7/C7/C14 H-Brücken-Ring charakterisiert, an dem alle drei NH-Gruppen beteiligt sind.

Synthetic foldamers such as α/β -, β - and γ -peptides have preferred secondary structures that often extend beyond those found in proteins entirely composed of naturally occurring α -amino acids. Due to the three-carbon bridge between amide groups, γ -peptides offer increased flexibility relative to α -peptides (one carbon) or β -peptides (two carbons). Recent progress in the synthesis of γ -amino acids is leading to an increased effort to understand the folding preferences of γ -peptides. Single-conformation spectroscopy provides the unique opportunity for studies on small γ -peptide oligomers under isolated conditions, where the inherent preferences can be probed in the absence of solvent effects. Such studies provide the natural point of connection with those testing the ability of molecular mechanics force fields or ab initio methods to properly capture the subtle balance of H-bonding, dispersive forces, and steric strain. In the present study, single-conformation IR-UV double-resonance spectroscopy was used to determine the conformer-specific IR spectra of two small γ -peptides, Ac- γ^2 -hPhe- γ^2 -hAla-NHMe and Ac- γ^2 -hAla- γ^2 -hPhe-NHMe. The single-conformation IR spectra in the NH stretch region reveal that Ac- γ^2 -hPhe- γ^2 -hAla-NHMe possesses four conformers, while Ac- γ^2 -hAla- γ^2 -hPhe-NHMe possesses three conformers. Four of the seven conformers form C9/C9 sequentially H-bonded double-ring structures, one conformer a C9/C14 bifurcated H-bonded double ring. The remaining two conformers form C7/C7/C14 H-bonded cycles involving all three amide NH groups, a conformation unprecedented in other peptides and peptidomimetics.

Hermann Weingärtner

Physikalische Chemie II – Physikalische Chemie der Flüssigkeiten;

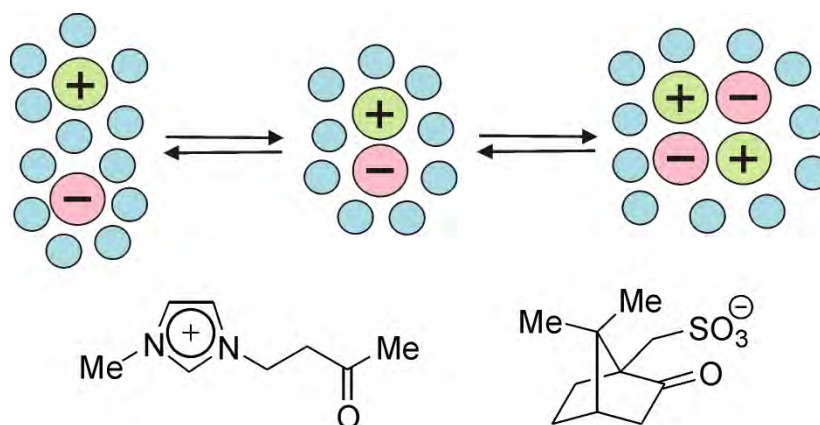
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-32-25535; FAX: ++49-(0)234-3214293

email: hermann.weingaertner@rub.de

M.-M. Huang, K. Schneiders, P. S. Schulz, P. Wasserscheid, H. Weingärtner, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13** (2011) 4126. Ion speciation driving chirality transfer in imidazolium-based camphorsulfonate ionic liquid solutions

Asymmetrische Katalyse basiert auf chiraler Induktion durch Reaktanten oder durch den Katalysator, während chirale Induktion durch das Reaktionsmedium wenig begünstigt ist, da schwache Kopplungen zwischen Gelöstem und Medium zu niedriger Enantioselektivität führen. Ionische Flüssigkeiten mit chiralen Kationen oder Anionen als Reaktionsmedien führen zu einem effektiveren Chiralitätsübertrag, da Ionen eine starke Wechselwirkung mit Gegenionen und ionischen Übergangszuständen eingehen können. Ein vielversprechendes Beispiel für Chiralitätstransfer zwischen entgegengesetzt geladenen Ionen ist die Ruthenium-katalysierte Hydrierung eines keto-funktionalisierten, prochiralen Imidazoliumions bei der ein chirales Camphersulfonate-Anion vermutlich durch die Bildung von Ionenpaaren im enantioselektiven Schritt Chiralität auf das Kation überträgt. Zusammen mit der Gruppe von P. Wasserscheid an der Universität Erlangen konnten wir diese zentrale Rolle der Ionenpaare durch dielektrische Relaxationsspektroskopie nachweisen. Darüber hinaus konnten wir zeigen, dass durch Bildung größerer Ionencluster bei hohen Konzentrationen der für den Chiralitätsübertrag wesentliche definierte Kontakt der Ionen zum großem Teil verloren geht, was zu einer experimentell beobachteten Abnahme der Enantioselektivität führt.

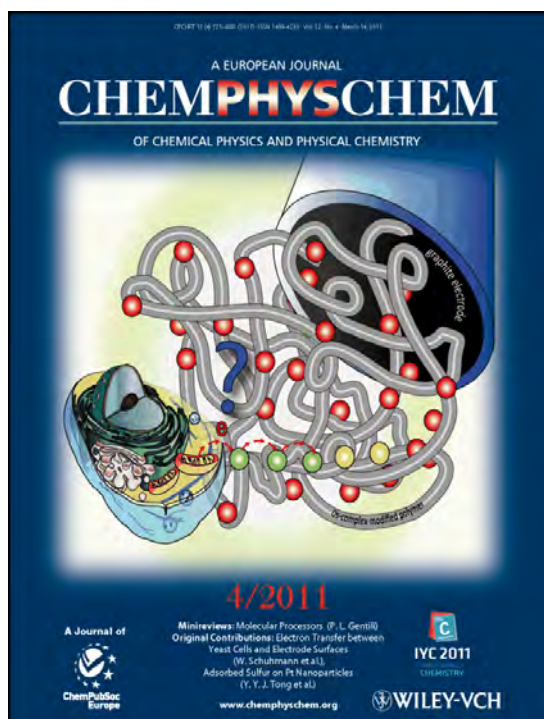


Asymmetric catalysis exploits chiral induction by reactants or catalysts, whereas chiral induction by the reaction medium is usually less favorable because the weak solute-solvent coupling leads to low enantioselectivity. Chiral ionic liquids as reaction media with chirality carried by the anion or cation enable more efficient chirality transfer because ions can strongly interact with counter ions and ionic transition states. An intriguing example for chirality transfer between oppositely charged ions is the ruthenium-catalyzed hydrogenation of a keto-functionalized, prochiral imidazolium-based cation in which the chiral camphorsulfonate anion induces chirality at the cation, presumably via ion pairing in the enantioselective reaction step. In collaboration with the group of P. Wasserscheid at the University of Erlangen we could prove this decisive role of ion pairs by dielectric relaxation spectroscopy. We could also show that upon formation of larger ion clusters at high concentrations the defined ion contact necessary for the chirality transfer is lost to a great extent, resulting in a decrease of the enantiomeric excess, as observed experimentally.

Wolfgang Schuhmann

Lehrstuhl für Analytische Chemie - Elektroanalytik & Sensorik; Center for Electrochemical Sciences – 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>

H. Shkil, A. Schulte, D.A. Guschin, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **12** (2011) 806-813.
Electron-transfer between genetically modified *Hansenula polymorpha* yeast cells and electrode surfaces via Os-complex modified redox polymers



Graphitelektroden, die mit in ein Redoxpolymer eingeschlossene Hefezellen modifiziert waren, wurden hinsichtlich des möglichen Elektronentransferpfades zwischen cytosolischen Redoxenzymen und der Elektrodenoberfläche untersucht. Wild-Typ oder genetisch modifizierte *Hansenula polymorpha* Hefezellen, die Flavocytochrome b2 (FC b2) überexprimieren, wurden in Os-Komplex modifizierte Elektrodepositionslacke integriert. Beim Erhöhen der L-Lactat-Konzentration konnte nur bei den genetisch modifizierten Zellen eine Stromerhöhung gemessen werden. Die Überexpression von FC b2 und die damit verbundene Verstärkung der L-Lactatoxidation durch FC b2 ist notwendig um für das Elektronenaustauschnetzwerk ausreichend Ladung zur Verfügung zu stellen, um die elektrochemische Kopplung zwischen den Zellen über das Redoxpolymer zur Elektrode zu ermöglichen. Der enge Kontakt zwischen Redoxpolymer und Zellwand scheint eine

notwendige Voraussetzung zu sein, um die the cytosolische FC b2/L-Lactataktivität zu kontaktieren und kann nur durch eine Einbindung eines in der Plasmamembran lokalisierten Redoxsystems erklärt werden. Die Kenntnis der Funktion des auf ganzen Zellen basierenden bioelektrochemischen Systems ist eine wesentliche Voraussetzung für die erfolgreiche Entwicklung entsprechender Biosensoren oder mikrobieller Biobrennstoffzellen.

Graphite electrodes modified with redox-polymer-entrapped yeast cells were investigated with respect to possible electrontransfer pathways between cytosolic redox enzymes and the electrode surface. Either wild-type or genetically modified *Hansenula polymorpha* yeast cells over-expressing flavocytochrome b2 (FC b2) were integrated into Os-complex modified electrodeposition polymers. Upon increasing the l-lactate concentration, an increase in the current was only detected in the case of the genetically modified cells. The overexpression of FC b2 and the related amplification of the FC b2/l-lactate reaction cycle was found to be necessary to provide sufficient charge to the electron-exchange network in order to facilitate sufficient electrochemical coupling between the cells, via the redox polymer, to the electrode. The close contact of the Os-complex modified polymer to the cell wall appeared to be a prerequisite for electrically wiring the cytosolic FC b2/l-lactate redox activity and suggests the critical involvement of a plasma membrane redox system. Insights in the functioning of whole-cellbased bioelectrochemical systems have to be considered for the successful design of whole-cell biosensors or microbial biofuel cells.

William S. Sheldrick

Analytische Chemie – Analytische Biokoordinationschemie & Strukturchemie

Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

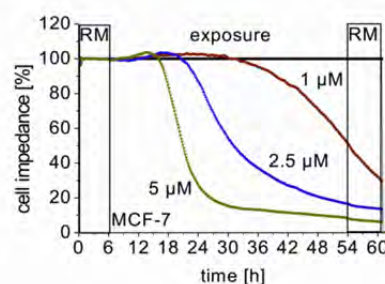
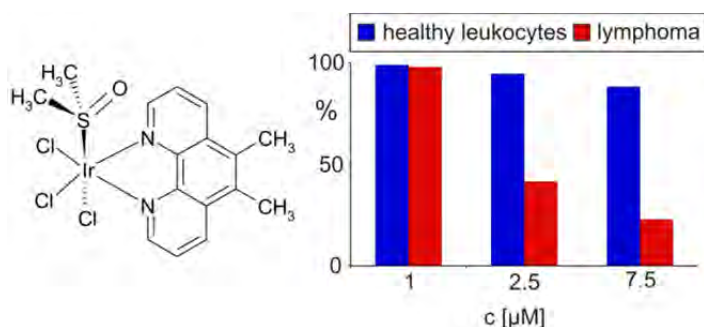
Tel: +49(0)234-3228019; Fax: +49-(0)234-3214420

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

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

Y. Geldmacher, I. Kitanovic, H. Alborzinia, K. Bergerhoff, R. Rubbiani, P. Wefelmeier, A. Prokop, R. Gust, I. Ott, S. Wölfl, W. S. Sheldrick, *ChemMedChem* **6** (2011) 429-439. Cellular selectivity and biological impact of cytotoxic rhodium(III) and iridium(III) complexes containing methyl-substituted phenanthroline ligands.

Aufgrund ihrer kinetischen Trägheit wurden Rhodium(III)- und besonders Iridium(III)-Verbindungen bisher als ungeeignete Kandidaten für Antitumor-Mittel eingestuft. Unsere systematischen Studien der zellulären Effekte von oktaedrischen Polypyridyl-Komplexen dieser Metalle haben aber gezeigt, dass durch die passende Auswahl der restlichen Liganden hohe Cytotoxizität gegenüber humane Tumorzellen und in spezifischen Fällen eine assoziierte relative Toleranz durch gesunde Zellen zu erreichen ist. Zum Beispiel, weist *fac*-[IrCl₃(DMSO)(5,6-Me₂phen)] eine signifikante Selektivität sowohl für adhärenzte als auch für nicht-adhärenzte bösartige Zellen auf. Die Selektivität der wesentlich potenteren meridionalen Rh(III)-Komplexe kann durch die Verwendung der Phenanthrolin-Substituenten 5-Cl bzw. 5-NO₂ noch erhöht werden. Als Stress-Antwort verursachen solche Komplexe eine sofortige und drastische Abnahme der Atmung von MCF-7 Brustkarzinoma-Zellen, gefolgt von der zeitlich verzögerten Induktion eines intrinsichen mitochondrialen Apoptose-Mechanismus.

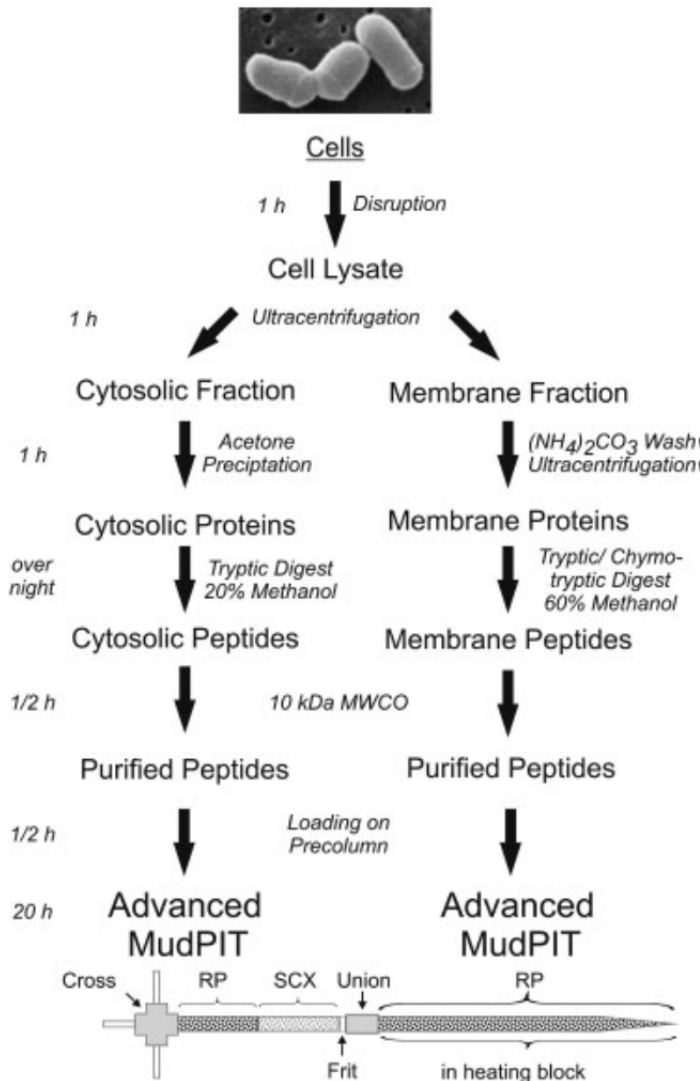


Until recently, rhodium(III) and particularly iridium(III) compounds were generally considered as being unlikely prospective candidates for anticancer agents owing to their typical kinetic inertness. Our systematic studies on the cellular impact of their octahedral polypyridyl complexes have, however, demonstrated that high cytotoxicity towards human cancer cells and in certain cases associated relative tolerance by healthy cells can be achieved by judicious selection of the remaining ligands. *fac*-[IrCl₃(DMSO)(5,6-Me₂phen)], for instance, exhibits a significant selectivity for both adhesive and non-adhesive malignant cells. Selectivity can be further significantly enhanced for the much more potent meridional rhodium(III) complexes by introducing 5-Cl or 5-NO₂ substituents into the phenanthroline ligand. As a response to oxidative stress signalling, these trichlorido complexes cause an immediate decrease in the respiration of MCF-7 breast cancer cells, followed by a time-delayed induction of apoptosis by an intrinsic mitochondrial pathway.

Dirk Wolters

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

B. Fränzel, D.A. Wolters, *Proteomics* **11** (2011) 3651-3656. Advanced MudPIT as a next step towards high proteome coverage



Einfache, zeit- und kosteneffektive Methoden für die Analyse von umfassenden Proteomen zu entwickeln, ist immer noch eine Herausforderung, um biologische Systeme auf Proteinebene zu erfassen. Mit unserem Ansatz gelingt es durch eine Kombination aus etablierten und leistungsstarken Techniken, diesem Ziel ein Stück näher zu kommen. Hierzu verwenden wir erhöhte Temperaturen (45° C) und überlange RP-Säulen (45 cm) in Verbindung mit der MudPIT Technologie. Mit diesem Advanced-MudPIT Ansatz lassen sich 53% Proteome Coverage für das gram-positive Bakterium *Corynebacterium glutamicum* und 46% Proteome Coverage des gram-negativen Bakteriums *Escherichia coli* erzielen. Schwierig zu analysierende Membranproteine können mit dieser Methode in ähnlicher Weise wie cytosolische Proteine nachgewiesen werden. Gleichzeitig wurden im Gegensatz zu anderen Verfahren nur 2 Fraktionen analysiert. Die Analysenzeit ist mit 20 Stunden absolut moderat, so dass innerhalb von 24 h Wasch-, Lade- und Blankruns ermöglicht werden.

We present a simple, time- and cost-efficient approach to tackle the proteome of prokaryotic organisms. To obtain large data sets of complex biological experiments high-throughput and time- and cost-efficient methods still have to be developed and refined. In this study, we combined well-approved techniques, namely elevated chromatographic temperatures, long RP columns and the multidimensional protein identification technology MudPIT to achieve high proteome coverage. The advanced MudPIT approach has been evaluated and delivered very comprehensive results for Gram-positive as well as Gram-negative bacteria (53% proteome coverage for *Corynebacterium glutamicum* and 46% proteome coverage for *Escherichia coli*). Also, a high identification rate for the challenging integral membrane proteins was achieved. The competitiveness of the advanced MudPIT technology is strengthened by the fact that in this approach only two fractions were analyzed with both, simple and time efficient sample preparation, and a moderate data acquisition time.

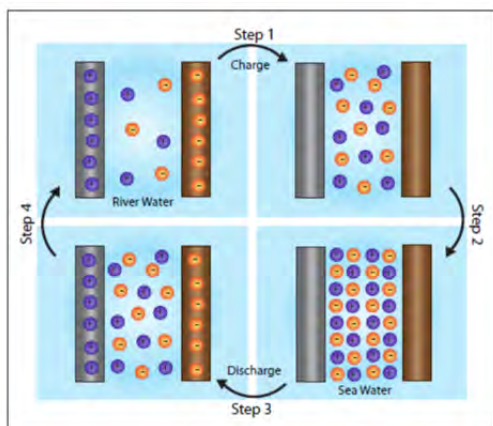
Fabio La Mantia

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

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

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

F. La Mantia, M. Pasta, H.D. Deshazer, B.E. Logan, Y. Cui, *Nano Lett.* **11** (2011) 1810.
Batteries for Efficient Energy Extraction from a Salinity Difference



Die effiziente Nutzung von regenerativen Energiequellen ist eine dringende Forschungsaufgabe. In dieser Arbeit wurde ein elektrochemisches Energiewandlungsprinzip, die „mixing entropy battery“ entwickelt. Die beim Mischen unterschiedlich konzentrierter Salzlösungen z.B. Meerwasser und Süßwasser auftretende Mischungsentropie kann für die Erzeugung von elektrischer Energie genutzt werden. Das Arbeitsprinzip wurde anhand einer Batterie, die mit einer Kationeneinfangelektrode aus nanostrukturiertem $\text{Na}_2\text{Mn}_5\text{O}_{10}$ und einer Anioneneinfangelektrode aus Silber arbeitet, gezeigt. Die Batterie

zeigte eine Effizienz von 74%. Durch Impedanzspektroskopie konnte der Beitrag der Einzelelemente zur gesamten Überspannung ermittelt werden. Hohe Überspannungen durch die Bildung einer AgCl Schicht an der Anode während der Chloroxidation wurden nachgewiesen, während die verdünnte Frischwasserlösung große Potentialsprünge verursachte. Auf Basis dieser Erkenntnisse kann die Batterie optimiert werden, sodass eine Effizienz von 83% möglich ist. Unter Berücksichtigung des Zuflusses von Süßwasser in die Ozeane als limitierende Größe kann mit diesem Prinzip eine Energie von 2 TW erzeugt werden, was etwa 13% des heutigen Energieverbrauchs entspricht.

Here we demonstrate an electrochemical device called “mixing entropy battery”, which can extract the wasted entropic energy derived from salinity gradient and transform it directly to electric energy, allowing renewable production of electricity. This battery can be applied to extract energy from the salinity difference between sea and river water. For the demonstration of the working principle, the mixing entropy battery was built by using a cation capturing electrode based on nanostructured $\text{Na}_2\text{Mn}_5\text{O}_{10}$ and an anion capturing electrode based on silver. The battery showed energy extraction efficiency up to 74%. By means of impedance spectroscopy it was possible to separate the contribution of the single elements of the device to the total overvoltage. It was possible to individuate high overpotentials connected with the formation and thickening of the AgCl layer on the Ag electrode during the capturing of the chloride ions. Also the diluted fresh water solution has shown to introduce high potential drops. An optimization process would be possible, and it is predicted that efficiencies up to 83% should be possible. Considering the flow rate of river water into ocean as the limiting factor, our calculations of potential energy production indicate that the total generated renewable energy could reach 2 TW, or ~13% of the current world energy consumption.

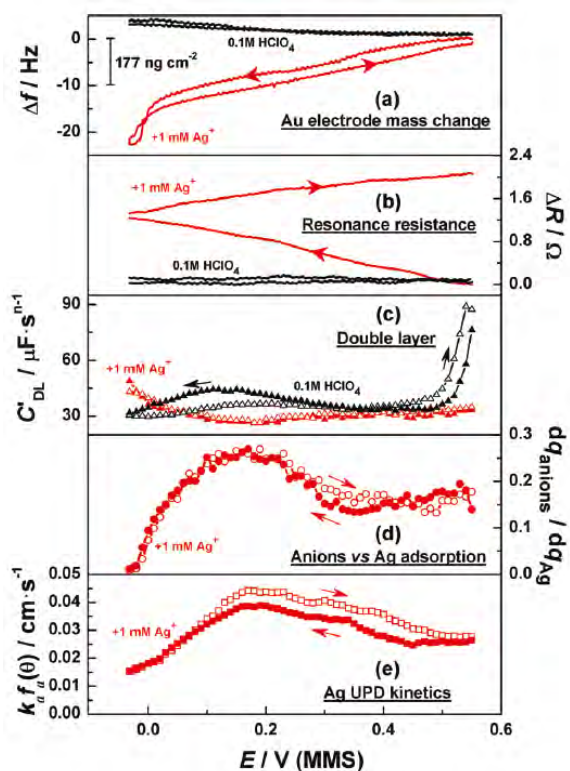
Aliaksandr Bandarenka

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

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

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

B.B. Berkes, A. Maljusch, W. Schuhmann, A.S. Bondarenko, *J. Phys. Chem. C* **115** (2011) 9122. Simultaneous acquisition of impedance and gravimetric data in a cyclic potential scan for the characterization of non-stationary electrode/electrolyte interfaces



Gleichzeitige Erfassung von Daten aus der elektrochemischen Impedanzspektroskopie und Quarzmikrowaagenmessungen (EIS-EQCM) während des zyklischen Elektrodenpotential-scannens wurde verwendet, um nichtstationäre Unterpotentialabscheidung (UPD) von atomaren Schichten von Ag auf Au- und Cu auf Pt zu charakterisieren. EIS- und EQCM-Datensätze ergänzten sich sowohl bei der Modellierung der Phasengrenzen als auch bei Untersuchungen von verschiedenen Aspekten der Phasengrenzendynamik. EIS-EQCM bot die Gelegenheit, Co-Adsorption und kompetitive Adsorption von Anionen während der Ag- und Cu-UPD zu beobachten mittels (i) der Elektrodenmassenänderung, (ii) der Adsorptionskapazitäten, und (iii) der Doppelschichtkapazitäten. Die Information über die Kinetik ist in der EIS-EQCM durch die Bestimmung von Charge-Transfer-Widerständen und Geschwindigkeitskonstanten zugänglich. Die letzteren drücken die Geschwindigkeit der UPD auf den teilweise be-

deckten Elektrodenoberflächen aus. Die EIS-EQCM scheint ein viel versprechendes Instrument für eine verbesserte Charakterisierung und besseres Verständnis von nichtstationären elektrochemischen Phasengrenzen zu sein.

Simultaneous acquisition of electrochemical impedance spectroscopy and quartz crystal microbalance (EIS-EQCM) data in cyclic electrode potential scans was used to characterize nonstationary underpotential deposition (UPD) of atomic layers of Ag on Au and Cu on Pt. Both EIS and EQCM data sets complemented each other in the elucidation of interface models and the investigation of different aspects of the interfacial dynamics. EIS-EQCM provided an opportunity to monitor coadsorption and competitive adsorption of anions during the Ag and Cu UPD using (i) the electrode mass change, (ii) adsorption capacitances, and (iii) double-layer capacitances. Kinetic information is available in the EIS-EQCM through the charge transfer resistances and apparent rate coefficients. The latter expresses the rate of UPD into the partially covered electrode surface. The EIS-EQCM appeared to be a promising tool for an improved characterization and understanding of nonstationary electrochemical interfaces.

Dominik Marx

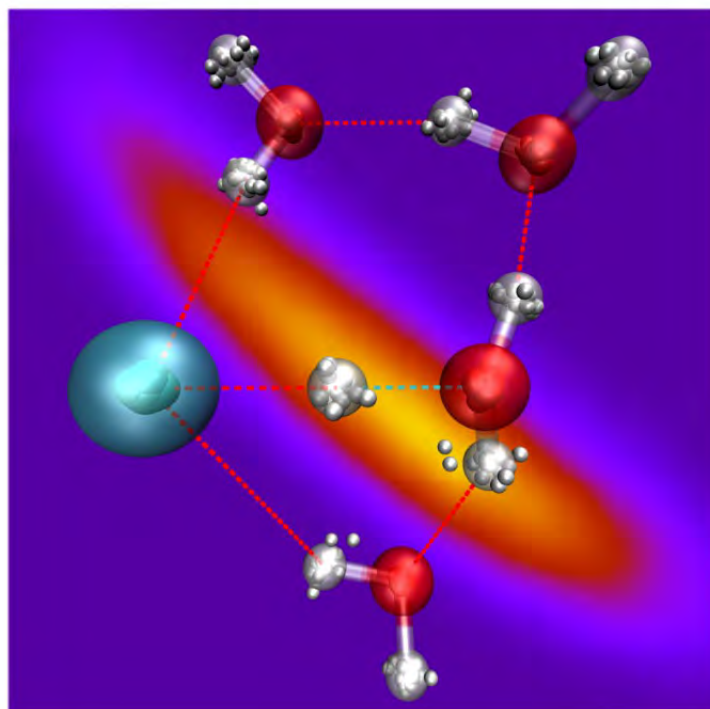
Lehrstuhl für Theoretische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

L. Walewski, H. Forbert, and D. Marx, *J. Phys. Chem. Lett.* **2**, (2011) 3069-3074. Quantum Induced Bond Centering in Microsolvated HCl: Solvent Separated versus Contact Ion Pairs

Quanteneffekte auf die Struktur dissoziierter $\text{HCl}(\text{H}_2\text{O})_4$ Cluster wurden mit ab initio Pfad-integralsimulationen studiert. Dieser Cluster kann in zwei unterschiedlichen zwitterionischen Spezies vorliegen, welche als minimale Mikrosolvatisierungsmodelle für solvensvermittelte Ionenpaare und Kontakt-Ionenpaare dienen. Die Struktur des Kontakt-Ionenpaars wird durch Kernquanteneffekte qualitativ verändert: die Wasserstoffbrücke, die das Ionenpaar direkt verknüpft, zentriert und ist fluxional aufgrund der Nullpunktsbewegung. Dieses sog. "low-barrier hydrogen bonding" Szenario ist relevant für die Dissoziation von Säuren bei sehr hohen Konzentrationen.



Nuclear quantum effects on the structure of dissociated $\text{HCl}(\text{H}_2\text{O})_4$ clusters are studied using ab initio path integral simulations. This cluster supports two distinct zwitterionic species serving as minimal microsolvation models for solvent-shared and contact ion pairs. The structure of the contact ion pair is qualitatively changed due to nuclear quantum effects: the hydrogen bond that directly connects the ion pair becomes both centered and fluxional as a result of zero point motion. This so-called "low-barrier hydrogen bonding" scenario is relevant to bulk acid dissociation ultra-high concentrations.

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

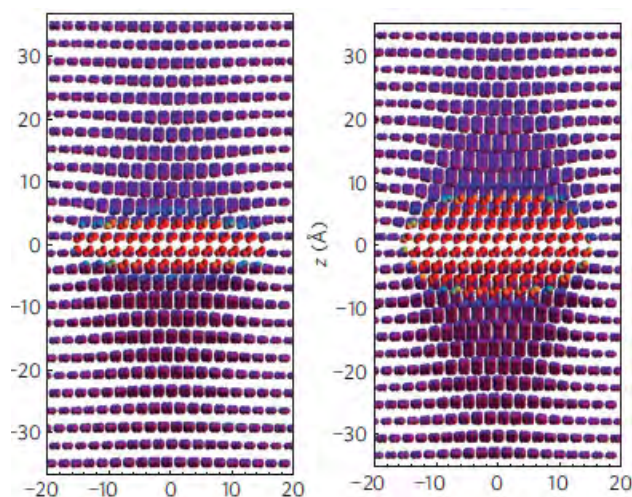
Jörg Behler

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

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

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

R. Z. Khaliullin, H. Eshet, T. D. Kühne, J. Behler, M. Parrinello, *Nature Materials* **10** (2011) 693-607. Nucleation mechanism for the direct graphite-to-diamond phase transition



Graphit und Diamant haben sehr ähnliche freie Energien. Dennoch erfordert die Bildung der kubischen Diamantstruktur ohne Katalysator Drücke, die deutlich höher als der Übergangsdruck im Gleichgewicht sind. Darüber hinaus ist bei niedrigen Temperaturen die Bildung des metastabilen hexagonalen Diamanten gegenüber der thermodynamisch stabilen kubischen Form bevorzugt. Dieses Phänomen kann nicht durch einen konzertierten Mechanismus erklärt werden. Unter Verwendung eines auf neuronalen Netzen basierenden Potentials, das annähernd ab initio Qualität aufweist, wurden ausge-

dehnte Untersuchungen der Graphit-Diamant Phasenumwandlung unter der Annahme eines Nukleationsmechanismus durchgeführt. Dieser Mechanismus beschreibt die experimentellen Beobachtungen und kann sie auf der atomaren Ebene erklären. Wir zeigen, dass die Gitterverzerrungen, die die Bildung von Diamantkeimen der kubischen Form begleiten, die Phasenumwandlung bei niedrigen Drücken verhindern und stattdessen zur Bildung der hexagonalen Modifikation führen.

Graphite and diamond have comparable free energies, yet forming diamond from graphite in the absence of a catalyst requires pressures that are significantly higher than those at equilibrium coexistence. At lower temperatures, the formation of the metastable hexagonal polymorph of diamond is favoured instead of the more stable cubic diamond. These phenomena cannot be explained by the concerted mechanism suggested in previous theoretical studies. Using an ab initio quality neural-network potential, we carried out a large-scale study of the graphite-to-diamond transition assuming that it occurs through nucleation. The nucleation mechanism accounts for the observed phenomenology and reveals its microscopic origins. We demonstrate that the large lattice distortions that accompany the formation of diamond nuclei inhibit the phase transition at low pressure, and direct it towards the hexagonal diamond phase at higher pressure. The proposed nucleation mechanism should improve our understanding of structural transformations in a wide range of carbon-based materials.

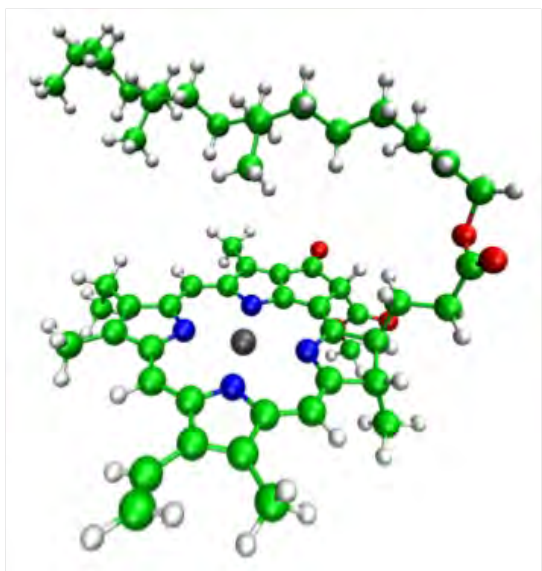
Christof Hättig

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

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

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

N. O. C. Winter, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **134** (2011) 184101. Scaled opposite-spin CC2 for ground and excited states with fourth order scaling computational costs



Es wird eine Implementierung von *scaled opposite-spin* CC2 (SOS-CC2) für die Berechnung von Energien für Grund- und angeregte Zustände vorgestellt, deren Rechenkosten nur mit der vierten Potenz der Systemgröße skalieren. SOS-CC2 liefert Ergebnisse mit einer Genauigkeit, die vergleichbar ist mit der von unskaliertem CC2. Während die zeitbestimmenden Schritte einer CC2-Rechnung mit der fünften Potenz der Systemgröße skalieren, kann man SOS-CC2-Ergebnisse mit geringer skalierenden Rechenkosten erhalten. Dazu werden die zeitbestimmenden Schritte unter Verwendung der Resolution-of-the-Identity-Näherung für die Zweielektronenintegrale und einer numerischen Laplace-Transformation der Orbitalenergienenner ausge-

führt. Für große Systeme können damit signifikante Einsparungen an Rechenzeit erhalten werden. Es werden Rechenzeiten für die Beschreibung von Grund- und angeregten Zuständen gezeigt und der Fehler der numerischen Laplace-Transformation untersucht. Die Berechnung eines Chlorophylls mit 134 Atomen wird durch die Verwendung des vorgestellten Algorithmus um einen Faktor fünf beschleunigt. Dies demonstriert die Anwendbarkeit der Methode für große Systeme. Eine SOS-Variante der Algebraischen Diagrammatischen Konstruktion zweiter Ordnung, ADC(2), kann als Vereinfachung des SOS-CC2-Modells erhalten werden und wird ebenfalls vorgestellt. Das SOS-ADC(2)-Modell ist für die Berechnung von spektralen Intensitäten und Geometrieoptimierungen im angeregten Zustand eine kostengünstige Alternative zu SOS-CC2.

An implementation of scaled opposite-spin CC2 (SOS-CC2) for ground and excited state energies is presented, that requires only fourth order scaling computational costs. The SOS-CC2 method yields results with an accuracy comparable to the unscaled method. Furthermore the time-determining fifth order scaling steps in the algorithm can be replaced by only fourth order scaling computational costs using a "resolution of the identity" approximation for the electron repulsion integrals and a Laplace transformation of the orbital energy denominators. This leads to a significant reduction of computational costs especially for large systems. Timings for ground and excited state calculations are shown and the error of the Laplace transformation is investigated. An application to a chlorophyll molecule with 134 atoms results in a speed-up by a factor of five and demonstrates how the new implementation extends the applicability of the method. A SOS variant of the algebraic diagrammatic construction through second order ADC(2), which arises from a simplification of the SOS-CC2 model, is also presented. The SOS-ADC(2) model is a cost-efficient alternative in particular for future extensions to spectral intensities and excited state structure optimizations.

Werner Kutzelnigg

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

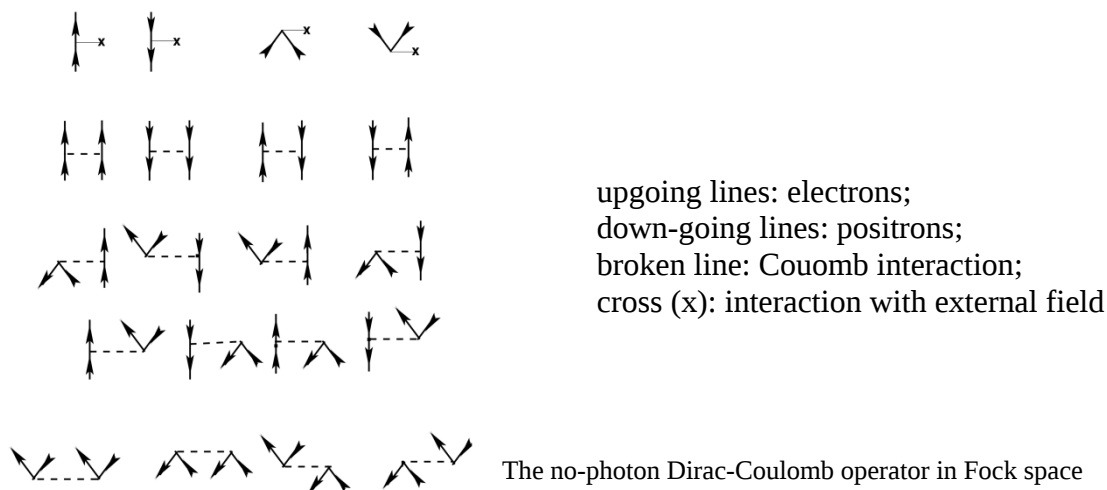
Tel.: ++49-(0)234-3226200; FAX: ++49-(0)234-3214109

e-mail: Werner.Kutzelnigg@rub.de

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

W. Kutzelnigg, *Chem. Phys.* **395** (2012) 16 [published online in 2011]. Solved and Unsolved Problems in Relativistic Quantum Chemistry.

Eine Hierarchie von Näherungen für die relativistische Viel-Elektronen-Theorie wird vorgestellt. Sie führt von der Dirac-Gleichung und ihrer Entwicklung in eine 'kinetic-balanced' Basis, über eine Formulierung für nicht-wechselwirkende Elektronen im Fock-Raum (der einzigen konsistenten Möglichkeit zur Berücksichtigung der Zustände negativer Energie) zu einem Hamilton-Operator für wechselwirkende Elektronen, hergeleitet aus der Quanten-Elektrodynamik (QED) in der Coulomb-Eichung unter Vernachlässigung der transversalen Photonen. Damit ist eine exakte (nicht-störungstheoretische) Entkopplung des elektromagnetischen Feldes vom Fermionenfeld möglich. Die elektrische Wechselwirkung der Fermionen ist nicht-retardiert und nicht-quantisiert. Die Quantisierung des Fermionen-Feldes führt zu einem polarisierbaren Vakuum mit Renormierung. Die einfachste (aber etwas problematische) Näherung ist die 'no-pair theory' mit Projektoren in einem äußeren Feld. Der Dirac-Coulomb Operator im Konfigurations-Raum ist unzulässig.



A hierarchy of approximations in relativistic many-electron theory is discussed that starts with the Dirac equation and its expansion in a kinetically balanced basis, via a formulation of non-interacting electrons in Fock space (which is the only consistent way to deal with negative-energy states). The most straightforward approximate Hamiltonian for interacting electrons is derived from quantum electrodynamics (QED) in Coulomb gauge with the neglect of transversal photons.

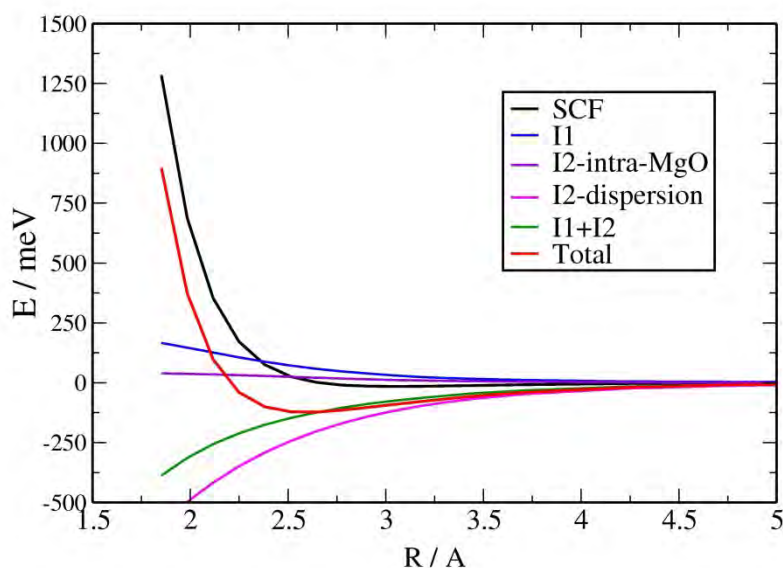
This allows an exact (non-perturbative) decoupling of the electromagnetic field from the fermionic field. The electric interaction of the fermions is non-retarded and non-quantized. The quantization of the fermionic field leads to a polarizable vacuum. The simplest (but somewhat problematic) approximation is a no-pair projected theory with external-field projectors. The Dirac Coulomb operator in configuration space (first quantization) is not acceptable, even if the Brown-Ravenhall disease is much less virulent than often claimed. Effects of transversal photons, such as the Breit interaction and renormalized self-interaction can be taken care of perturbatively at the end, but there are still many open questions.

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>

V. Staemmler, *J. Phys. Chem. A*, **115** (2011) 7153. Method of Local Increments for the Calculation of Adsorption Energies of Atoms and Small Molecules on Solid Surfaces. 2. CO/MgO(001).

Eine genaue Berechnung von Adsorptionsenergien kleiner Molekülen an Festkörper-Oberflächen ist mit wellenfunktions-basierten quantenchemischen *ab initio* Methoden auch im Falle schwacher van der Waals-Bindungen möglich, aber solche Rechnungen sind extrem zeitaufwändig. Die Methode der „lokalen Inkremente“, bei der die gesamte Wechselwirkung in eine Summe von Ein-, Zwei- und Mehrteilchen-Beiträgen aufgeteilt wird, führt einerseits ohne Verlust an Genauigkeit zu einer wesentlichen Reduktion der Rechenzeit, ergibt andererseits ein anschauliches Bild der verschiedenen Beiträge zur Wechselwirkungsenergie: Pauli-(SCF) Abstoßung, van der Waals-Anziehung (Dispersion), Änderung der Teilsysteme durch die Wechselwirkung. Für die Adsorption von CO an der MgO(001) Oberfläche konnte so erstmals eine zuverlässige Potentialkurve berechnet werden, ohne dass auf semiempirische Parameter zurückgegriffen werden musste.



An accurate calculation of adsorption energies for small molecules on solid surfaces is possible with wave function based quantum chemical *ab initio* methods, even in the case of weak van der Waals interactions, but such calculations are extremely time consuming. The method of “local increments”, where the total interaction is decomposed into a sum of one-body, two-body and higher increments, leads to a strong reduction of the necessary computer time without loss of accuracy and allows for a simple physical interpretation of the different contributions to the total interaction energy: Pauli (SCF) repulsion, van der Waals attraction (dispersion), modification of the partners by the interaction. By means of this approach, we could calculate for the first time a reliable potential energy curve for the adsorption of CO on the MgO(001) surface without using semiempirical parameters.

Robert Franke

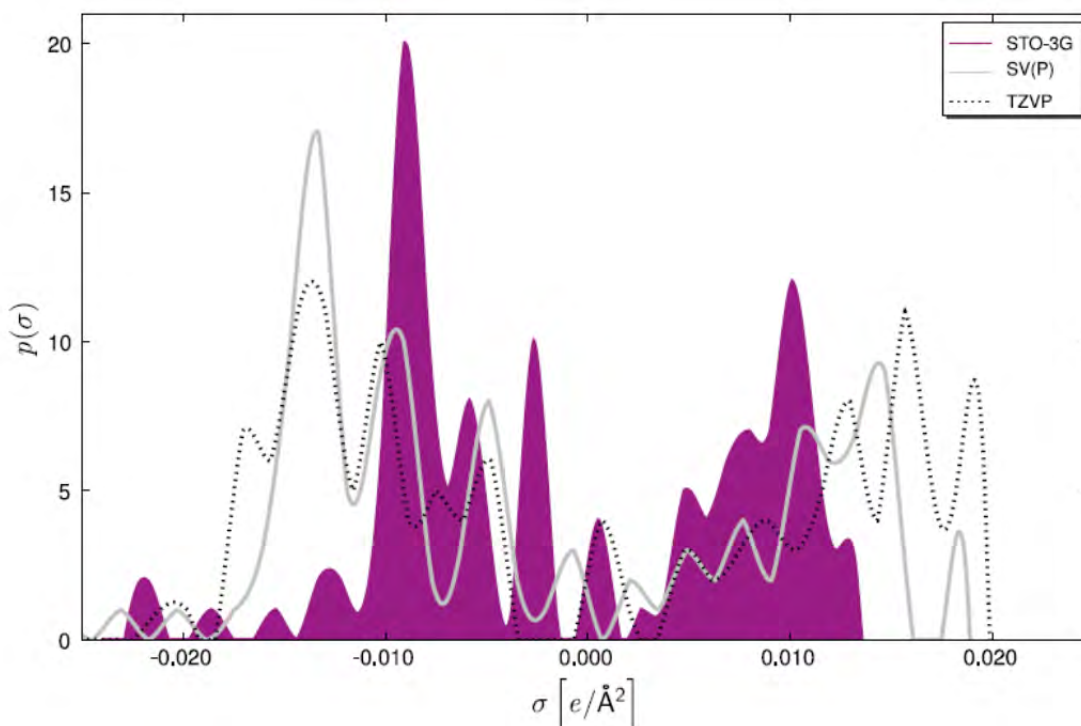
Evonik Industries AG, Paul-Baumann-Straße 1, 45772 Marl

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

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

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

R. Franke, B. Hannebauer, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, (2011) 21344-21350. On the influence of basis set and quantum chemical method on the prediction accuracy of COSMO-RS for activity coefficients at infinite dilution



In dieser Arbeit werden erstmalig Untersuchungen zur Abhängigkeit der Genauigkeit der mit dem „conductor-like screening model of real solvents“ (COSMO-RS) berechneten Grenzaktivitätskoeffizienten von dem verwendeten Basissatz und der eingesetzten quantenchemischen Methode veröffentlicht. Temperaturvariierte Aktivitätskoeffizienten dienen als experimentelle Größe für die Optimierung der COSMO-RS Parameter. Eine Modifikation der Energiefunktion des COSMO-RS wird vorgestellt, die zu einer höheren Genauigkeit der Parameterisierung führt. Bei Dichtefunktionalmethoden wird mindestens eine Valenz-Double-Zeta-Basis für gute Genauigkeiten benötigt. Bemerkenswerterweise zeigen größere Basissätze bei allen untersuchten Funktionalen aber keine Vorteile. Die genaueste Parameterisierung konnte mit MP2 erzielt werden.

This paper offers for the first time an investigation into the dependence of the accuracy of activity coefficients at infinite dilution, calculated from the conductor-like screening model for real solvents (COSMO-RS), on the basis set and the quantum chemical method used. Activity coefficients at various temperatures serve as experimental parameters for optimising the COSMO-RS parameters. A modification of the energy function of COSMO-RS is presented; this leads to a higher accuracy of parameterisation. When using density functional theory, at least a valence double-zeta basis set is necessary for good accuracy. Interestingly, for all the investigated functionals, larger basis sets show no advantages. The most accurate parameterisation was obtained with MP2.

Martin Muhler

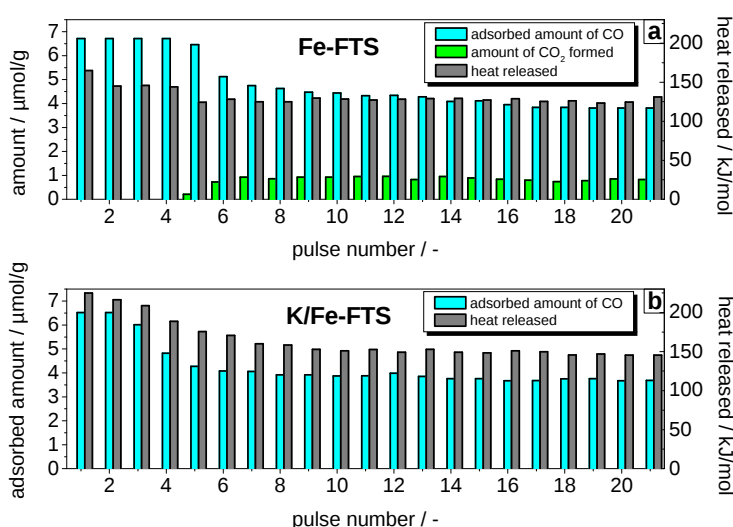
Lehrstuhl für Technische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

B. Graf, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** (2011) 3701-3710. The Influence of the Potassium Promoter on the Kinetics and Thermodynamics of CO Adsorption on a Bulk Iron Catalyst Applied in Fischer-Tropsch Synthesis: A Quantitative Adsorption Calorimetry, Temperature-Programmed Desorption, and Surface Hydrogenation Study.

Die Fischer-Tropsch-Synthese ist ein etablierter industrieller Prozess zur Umwandlung von Synthesegas (CO , H_2) in hauptsächlich lineare Kohlenwasserstoffe mit einer breiten Verteilung der Kettenlänge. Es werden häufig Eisenkatalysatoren eingesetzt, die mit Kupfer oder Kalium promotiert sind, um die Eigenschaften bezüglich der CO-Dissoziation zu verbessern. Da die CO-Dissoziation ein Schlüsselschritt ist, wurden die Kinetik und die Thermodynamik der CO-Adsorption/Dissoziation systematisch untersucht. Durch die Kombination unterschiedlicher Analysenmethoden konnte gezeigt werden, dass die Anwesenheit von Kalium zu einer Erhöhung der Fe-C-Bindungsstärke führt und damit die CO-Dissoziation begünstigt. Außerdem werden durch die Kalium-Promotierung diejenigen Oberflächenzentren blockiert, die eine hohe Adsorptionsenergie aufweisen. Dadurch ändert sich die Energieverteilung der für die CO-Adsorption zur Verfügung stehenden Zentren.



CO pulse adsorption experiments at 613 K: Higher heats of adsorption of CO on K/Fe-FTS point to a stronger Fe-C bond and the linear decrease of the differential heat of dissociative CO adsorption on K/Fe-FTS suggests an increased energetic heterogeneity of the catalyst surface.

The Fischer-Tropsch synthesis (FTS) is a well-established industrial process for converting synthesis gas (CO , H_2) into mainly linear hydrocarbons with a broad carbon number distribution. The industrial FTS process is often performed using iron catalysts promoted with copper or potassium in order to improve its CO dissociation properties. As the dissociation of CO is one of the key steps the kinetics and thermodynamics of CO adsorption/dissociation were systematically investigated. Using a combination of different analytical methods it was shown that the Fe-C bond was strengthened in the presence of potassium leading to a facilitated CO dissociation. Furthermore potassium promotion led to a blocking of high-energy adsorption sites on the catalyst surface, thus changing its energy distribution.

Wolfgang Grünert

Technische Chemie – Struktur/Aktivität heterogener Katalysatoren

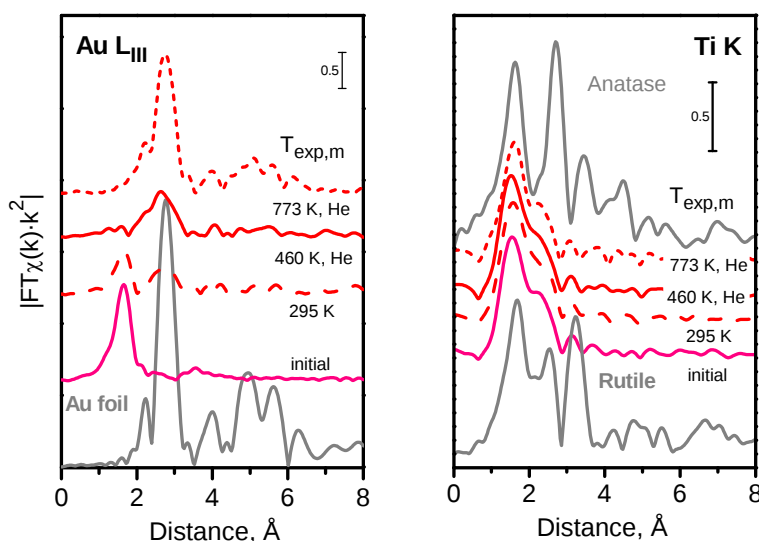
Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

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

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

M. W. E. van den Berg, A. De Toni, M. Bandyopadhyay, H. Gies, W. Grünert, *Appl. Catal. A* **391** (2011) 268-280. CO oxidation with Au/TiO₂ aggregates encapsulated in the mesopores of MCM-48: Model studies on activation, deactivation and metal-support interaction

Das hochaktive Katalysatorsystem Au/TiO₂ wurde in einer Modellversion realisiert, indem es in eine mesoporöse Matrix (MCM-48) eingeschlossen wurde, um höchste Dispersität sowohl für das Metall als auch für den Träger zu erzwingen. Die erzielten Aktivitäten in der CO-Oxidation waren mit denen realer Katalysatoren vergleichbar. Die völlige Unabhängigkeit des TiK-EXAFS-Spektrums bei dramatischen Änderungen im Zustand des Goldes (Abbildung) zeigt, dass hohe Katalysatoraktivität einer geordneten (epitaktischen) Beziehung zwischen Metall und Träger nicht bedarf. Da die mittlere Teilchengröße des Goldes deutlich unter 1 nm lag, ist auch der Nichtmetall-Metall-Übergang für dessen hohe Aktivität unerheblich. Während der Aktivierung der Modellkatalysatoren im Reaktionsgemisch wurden erhebliche Vergiftungsphänomene (vermutlich durch Carbonat) beobachtet, die durch thermische Behandlung im Inertgas rückgängig zu machen sind. Ihr viel schwächeres Auftreten bei realen Katalysatoren legt nahe, dass die (weitaus größere) Trägeroberfläche der Realkatalysatoren den aktiven Au-TiO₂-Perimeter durch Abfangen und Speichern der vergiftenden Spezies schützt.



A model version of the highly active Au/TiO₂ catalyst system was made by inserting both components into a mesoporous MCM-48 matrix in order to enforce high dispersion on both metal (Au) and support (TiO₂). In CO oxidation, activities achieved were comparable with those of real catalysts. The TiK EXAFS spectrum proved to be completely invariant notwithstanding great variations in the state of gold (figure), which shows that high activity does not require an ordered (epitactic) relation between metal and support. From the average Au particle size being below 1 nm it was concluded that the metal-non metal transition is irrelevant for the activity of gold. During activation of the model catalysts in the feed, significant poisoning phenomena (probably by carbonate) were observed. Such poisoning is much less pronounced with real catalyst, which suggests that the much larger TiO₂ surface of real catalysts protects the active Au-TiO₂ perimeter by trapping and storing poisonous adsorbates.

Michael Wark

Technische Chem. – Heterogene Photokatalyse; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3228328; FAX: ++49-(0)234-14115
email: michael.wark@techem.rub.de; <http://www.techem.ruhr-uni-bochum.de>

R. Marschall, M. Sharifi, M. Wark, *Chemie-Ingenieur-Technik* **83** (2011) 2177-2187. Protonenleitende Komposit-Membranen für zukunftsorientierte Anwendungen in Brennstoffzellen, Entsalzungsanlagen und in der Photokatalyse



Anorganische Füllmaterialien dienen oft der Verbesserung der mechanischen, thermischen und chemischen Eigenschaften von Polymermembranen. Im Falle protonenleitender Polymere ist es dabei allerdings gleichzeitig nötig, die Protonenleitung der Matrix zu unterstützen bzw. wenigstens nicht zu stören. Durch geeignete Kombinationen aus Polymer und Füllmaterial können so effektive und sehr gut leitfähige Kompositmembranen hergestellt werden. Dieser Artikel gibt einen Überblick über die möglichen Anwendungen einer speziellen Form derartiger protonenleitender Kompositmembranen, die funktionalisierte SiO_2 -Partikel mit geordneter Mesoporosität enthält, in Brennstoffzellen, zur Entsalzung von Wasser und in der Photokatalyse.

Insbesondere in dem hochaktuellen Themengebiet der photokatalytischen Wasserspaltung finden diese Kompositmembranen eine wichtige Anwendung: So wird die Konstruktion

einer 2-Kammer Zelle beschrieben, mit der es durch Einsatz besagter Membranen möglich wird, Wasserstoff und Sauerstoff räumlich getrennt voneinander zu generieren, so dass hohe Kosten für nachträgliche Gastrennung und –aufreinigung gespart werden können. Außerdem wird in diesem Zusammenhang gezeigt, dass die Menge an funktionalisierten mesoporösen SiO_2 -Partikeln ein wichtiger Faktor in der Protonenleitfähigkeit der Komposite ist.

Inorganic filler materials are often incorporated into polymer membranes to improve their mechanical, thermal and chemical stabilities. In case of proton-conducting polymers, however, it is necessary to support or at least not to disturb the proton-conducting matrix. By suitable combination of polymer and filler, effective and highly conductive composite membranes can be prepared. This article gives an overview of the possible applications of a special kind of such proton-conducting composite membranes containing functionalised SiO_2 particles with ordered mesoporosity in fuel cells, in desalination and in photocatalysis.

Particularly, these composite membranes find an important application in the highly active area of the photocatalytic water splitting: Thus, in the article, the construction of a 2-compartment cell is described with which it is possible by use of the mentioned membranes to generate hydrogen and oxygen spatially separated from each other, so that high costs for subsequent gas separation and purification can be saved. Additionally, it is also shown in this context that the amount of functionalized mesoporous SiO_2 particles is a major factor in the proton conductivity of the composites.

Yuemin Wang

Tech. Chem. / Phys. Chem. - Oberflächenchemie;

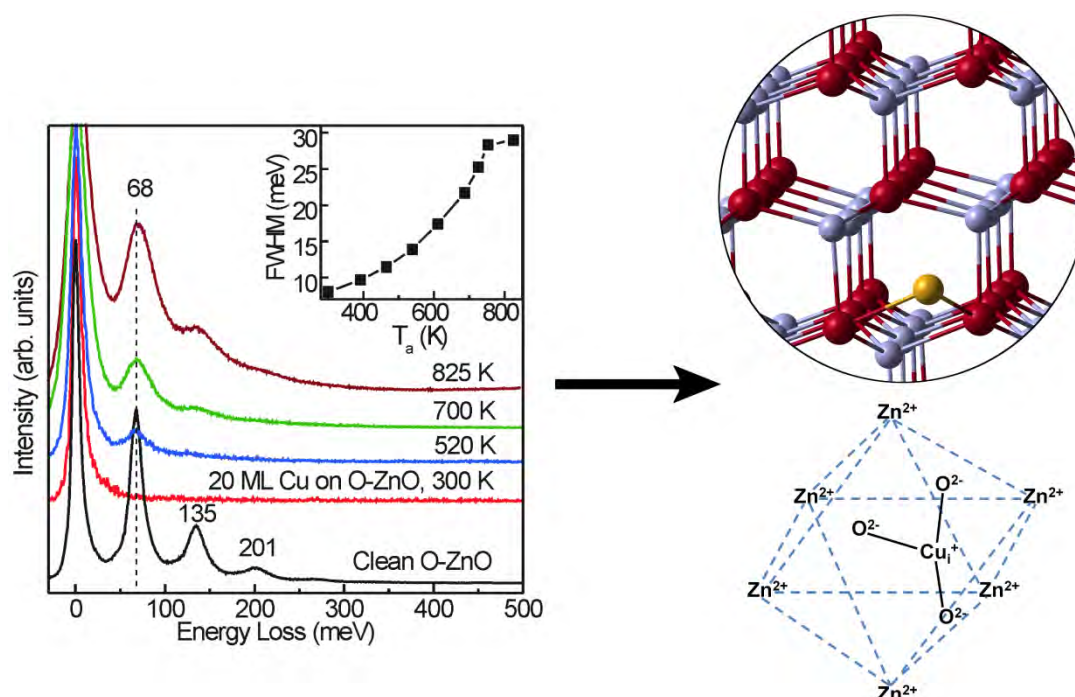
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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>

H. Qiu, F. Gallino, C. Di Valentin, Y. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 066401. Shallow donor states induced by in-diffused Cu in ZnO: A combined HREELS and hybrid DFT study.

Mit Hilfe von hochauflösender Elektronenenergieverlust-Spektroskopie (HREELS) und Ersten-Prinzipien-Rechnungen wurden Cu-Defekte in ZnO-Volumen untersucht. Die Kupferpartikel wurden epitaktisch auf die polare O-ZnO(0001)-Oberfläche bei Raumtemperatur deponiert. Beim Erhitzen wird eine Verbreiterung des quasielastischen Signals in den HREELS-Daten beobachtet, was einem elektronischen Dotierungseffekt von Cu-Atomen in ZnO-Volumen mit einer Ionisierungsenergie von 88 meV entspricht. Die Cu-Fremdatome, die im allgemeinen als Akzeptoren in ZnO fungieren, bilden bei O-ZnO(0001) ungewöhnliche flache Donorzustände in der ZnO-Bandlücke aus. Darüber hinaus wurden interstitielle Cu^+ -Spezies mittels Hybrid-DFT-Rechnungen identifiziert.



A combined experimental and first principles study of Cu defects in bulk ZnO is presented. Cu particles are epitaxially deposited on the polar O-ZnO(0001) surface at RT. Upon heating, a broadening of the quasi-elastic peak in high resolution electron energy loss spectra is observed, corresponding to an electronic doping effect of Cu atoms in bulk ZnO with an ionization energy of 88 meV. Cu impurities in ZnO, although commonly acting as acceptors, are presently observed to induce shallow donor states. We assign these to interstitial Cu^+ species on the basis of a hybrid density functional study.

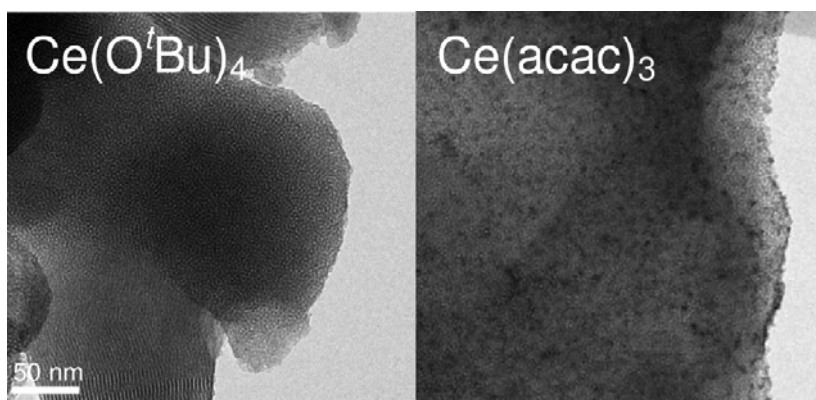
Jennifer Strunk

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

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

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

J. Strunk, W. C. Vining, A. T. Bell, *J. Phys. Chem. C* **115** (2011) 4114-4126. Synthesis of Different CeO₂ Structures on Mesoporous Silica and Characterization of Their Reduction Properties.



Für Übergangsmetalle wie zum Beispiel TiO₂ und V₂O₅ existieren bereits gut etablierte Prozesse, um (Sub)Monolagen auf inerte Träger aufzubringen. Bei geringen Bedeckungen werden so durch die M-O-Si-Bindungen neue aktive Zentren gebildet, während bei hohen Bedeckungen die Eigenschaften des katalytisch

aktiven Oxids mit der großen Oberfläche des inerten Trägers kombiniert werden. Für das einfach reduzierbare Seltenerdoxid CeO₂ sind bisher keine Studien veröffentlicht worden, in denen Schichten erfolgreich synthetisiert und umfassend charakterisiert wurden. In der vorliegenden Arbeit wurde der Einfluss der Art des Präkursors und der Synthesemethode auf die Struktur der abgeschiedenen Ceroxidspesies untersucht. Einheitliche Ceroxidnanopartikel mit einem Durchmesser von 3 nm wurden erhalten, wenn Ceracetylacetonat auf SiO₂ gegrattet wurde. Schichtartige Strukturen konnten erfolgreich synthetisiert werden, wenn Cer-*tert.*-butoxid verwendet wurde. Die Reduzierbarkeit der beiden strukturell unterschiedlichen Ceroxidspesies ist identisch, aber im Fall der Schichten wird die Reduktion partiell irreversibel, wenn sie bei 923 K durchgeführt wird. Dieser Effekt könnte der Bildung von Cersilikaten zuzuschreiben sein, welche die Reoxidation des Cers verhindern. Im Fall der Nanopartikel ist die Reduktion komplett reversibel.

For transition metal oxides such as TiO₂ or V₂O₅ well-established processes exist to support (sub)monolayers on inert supports. At low coverage new active sites due to M-O-Si bonds are created, and at high coverage the properties of the catalytically active oxide are combined with the large surface area of the inert support. For the easily reducible rare earth oxide CeO₂, no previous studies have been published in which layers were successfully prepared and thoroughly characterized. In the present work, the effect of the nature of the precursor and the synthesis method on the structure of the deposited ceria species has been evaluated. Uniform ceria nanoparticles with a diameter of 3 nm have been obtained by grafting cerium acetylacetonate on silica. Layer-like species could be successfully synthesized when using cerium *tert.*-butoxide. The reducibility of both structurally different ceria species is similar, however, in case of the layers, when reduction is carried out at 923 K, it becomes partially irreversible. This effect might be attributed to the formation of cerium silicates that prevent reoxidation of cerium. In case of the nanoparticles reduction is fully reversible.

Michael Hollmann

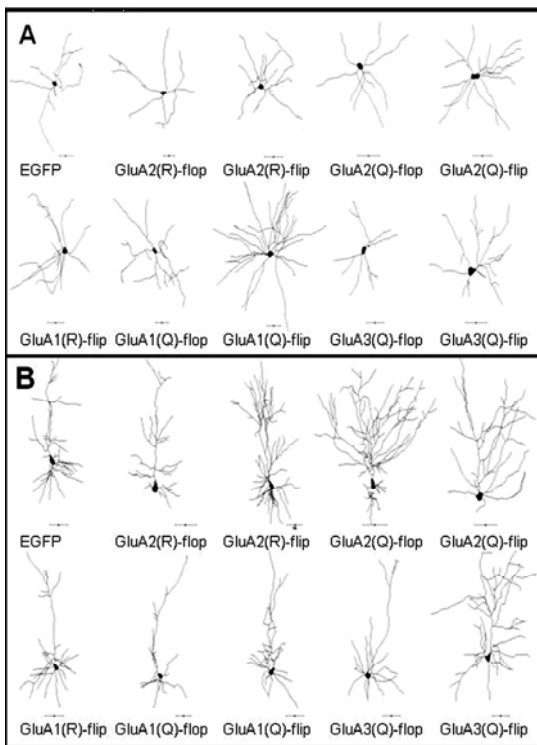
Biochemie I - Rezeptorbiochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: michael.hollmann@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/bc1>

I.K. Hamad, Z.-L. Ma-Högemeier, C. Riedel, C. Conrads, T. Veitinger, T. Habijan, J.-N. Schulz, M. Wirth, M. Krause, M. Hollmann, P. Wahle, *Development* **138** (2011) 4001-4013. Cell class-specific regulation of neocortical dendrite and spine growth by AMPA receptor splice and editing variants

Die Leistungsfähigkeit des menschlichen Gehirns resultiert aus der Komplexität der Interaktionen seiner ca. 100 Milliarden Nervenzellen mit ihren durchschnittlich jeweils 7000 Kontakten mit anderen Neuronen. Diese weitgehend unverstandene komplexe Verschaltung beruht unstrittig auf der Aktivität der jeweiligen Neurone, die ihrerseits auf deren Ausstattung mit Neurotransmitterrezeptoren basiert, die Signale anderer Neurone empfangen. Glutamat-rezeptoren als die zahlenmäßig größte Gruppe von Rezeptoren spielen hier eine besondere Rolle, weshalb ein Verständnis ihrer strukturellen Vielfalt und der damit verbundenen funktionellen Vielfalt essentiell ist. In unserer Studie haben wir den Zusammenhang zwischen Glutamat-rezeptorvarianten und Dendritenbaummorphologie von insgesamt 16.000 Neu-



ronen analysiert und dabei festgestellt, dass je nach Neuronentyp unterschiedliche Rezeptorvarianten die Dendritogenese forcieren. In Interneuronen (Abb. A) ist das ausschließlich GluA1(Q)-flip, in Pyramidalneuronen (Abb. B) hingegen GluA2(R)-flip, GluA2(Q)-flip, GluA2(Q)-flop und GluA3(Q)-flip, deren gemeinsamer funktioneller Nenner eine langsame Desensitisierung und damit erhöhter Calciumeinstrom ist, der wiederum Dendritogenese auslöst.

The computational power of the human brain results from the complexity of the myriad interactions of its roughly 100 billion nerve cells which, on average, make 7000 contacts with other neurons. This largely unexplained complex network is clearly based upon the electrical activity of the participating neurons, which in turn is dependent on the neurotransmitter receptors that receive signals from other neurons. Glutamate receptors, the most widely expressed group of

neurotransmitter receptors, play a very special role in this signaling. This is why understanding the structural diversity that underlies their functional variability is essential. In our study we analyzed the connection between glutamate receptor variants and dendritic tree morphology of some 16.000 neurons and found that, depending on the type of neuron, different receptor subunits trigger dendritogenesis. In interneurons (Fig. A), GluA1(Q)-flip is the sole effective subunit, while in pyramidal neurons (Fig. B) GluA2(R)-flip, GluA2(Q)-flip, GluA2(Q)-flop and GluA3(Q)-flip serve that role. The common denominator of the latter four subunits is their slow desensitization, which leads to increased calcium influx that ultimately triggers dendritogenesis.

Guiscard Friedrich Aldous Seeböhm

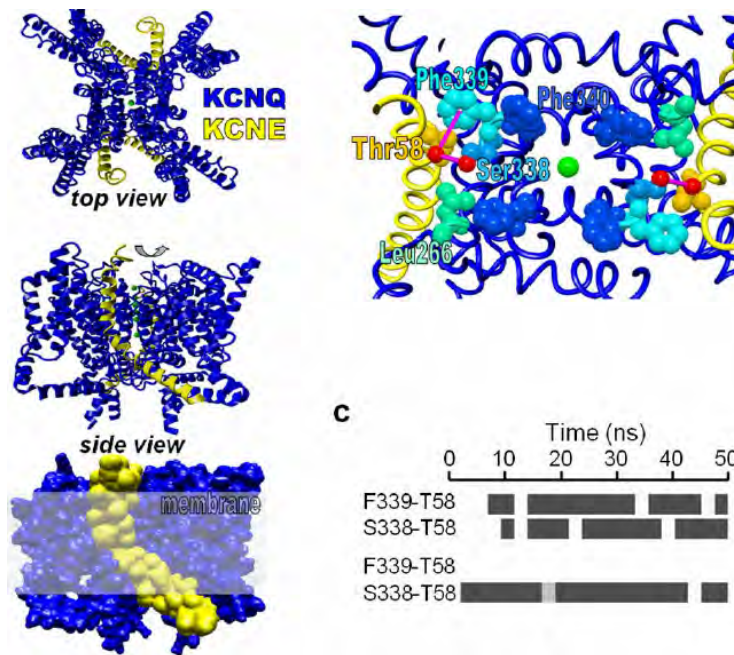
AG Kationenkanäle; Biochemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: guiscard.seeböhm@rub.de;

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

N. Strutz-Seeböhm, M. Pusch, S. Wolf, R. Stoll, D. Tapken, K. Gerwert, B. Attali, G. Seeböhm, *Cell Physiol. Biochem.* 27(5)(2011) 443-52. Structural basis of slow activation gating in the cardiac I_{Ks} channel complex.



Accessorische β -Untereinheiten der KCNE-Genfamilie modulieren die Funktion vieler Kationenkanäle. Zu den dramatischsten Effekten dieser Art gehören die biophysikalischen Veränderungen spannungsgesteuerter Kanäle durch die KCNEs. Das Paradebeispiel für eine KCNE-induzierte Änderung ist die Funktionsänderung des Kv7.1 durch Assoziation mit der β -Untereinheit KCNE1 welche die Grundlage des nativen Kaliumstromes I_{Ks} ist. In dieser Studie wurden die molekularen Interaktionen mit den Techniken Scanningmutagenese, double-mutant-cycle-Analysen und molekulare Dynamiksimulationen untersucht.

Unsere Befunde suggerieren, dass KCNE1 an der äusseren Oberfläche der Porenregion und zwischen den Spannungssensormodulen bindet. Molekulare Dynamiksimulationen in einer gemischten Membranumgebung und Hidden-Markow-Modellierung der Kanalkinetik deuten auf eine stabile Interaktion der KCNE1-Transmembrandomänen- α -Helix mit der Porendomäne S5/S6 und der S4-Spannungssensorhelix des Kv7.1 in einem Preopen-Zustand hin. Das neue Kv7.1-KCNE1-Modell sollte für zukünftige Simulationen und Planung von biophysikalischen, sowie pharmakologischen Versuchen von Nutzen sein.

Accessory β -subunits of the KCNE gene family modulate the function of various cation channel α -subunits by the formation of heteromultimers. Among the most dramatic changes of biophysical properties of a voltage gated channel by KCNEs are the effects of KCNE1 on Kv7.1 channels. Kv7.1 and KCNE1 are believed to form native I_{Ks} channels. Here, we characterize molecular determinants of KCNE1 interaction with Kv7.1 channels by scanning mutagenesis, double mutant cycle analysis, and molecular dynamics simulations. Our findings suggest that KCNE1 binds to the outer face of the Kv7.1 channel pore domain, modifies interactions between voltage sensor, S4-S5 linker and the pore domain, leading to structural modifications of the selectivity filter and voltage sensor domain. Molecular dynamics simulations suggest a stable interaction of the KCNE1 transmembrane α -helix with the pore domain S5/S6 and part of the voltage sensor domain S4 of Kv7.1 in a putative pre-open channel state. Formation of this state may induce slow activation gating, the pivotal characteristic of native cardiac I_{Ks} channels. This new Kv7.1-KCNE1 model may become useful for dynamic modeling of disease associated mutant I_{Ks} channels.

Rolf Heumann

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

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

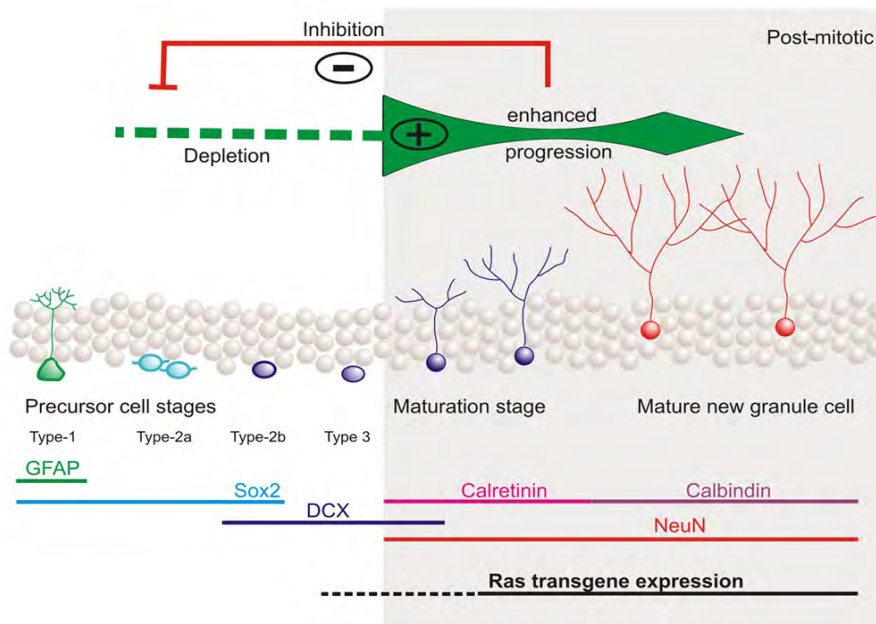
email: rolf.heumann@rub.de;

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

M. Manns, O. Leske, S. Gottfried, Z. Bichler, P. Lafenetre, P. Wahle, R. Heumann, *Front. Neurosci.* 5 (2011) 18. Role of neuronal ras activity in adult hippocampal neurogenesis and cognition.

Durch den gezielten Austausch einer einzigen der ca 3 Milliarden DNS Basenpaare der Maus in einem Gen, das für ein zentrales Signalprotein kodiert (genannt „Ras“), können wir wesentliche Funktionen von Nervenzellen steuern. Mit unseren Untersuchungen wollen wir erforschen, welche molekularen Signalprozesse bei der Aktivierung von Nervenzellen durch elektrische Reize oder bei bestimmten Lernprozessen erzeugt werden. Der Hippocampus ist eine Gehirnregion, in der –im Gegensatz zu den meisten anderen Gehirnstrukturen- auch im erwachsenen Organismus neue Nervenzellen erzeugt werden. Die Regulation und Funktion dieser „erwachsenen Neurogenese“ ist nicht geklärt. Durch die genetische Aktivierung von Ras in Nervenzellen wird die Neurogenese im Hippocampus herabgesetzt und kann durch freiwillige Bewegung („joggen“) im Laufrad wieder rückgängig gemacht werden. Wir führen dies auf die durch „Sport“ induzierte Neusynthese eines „neurotrophen“ Proteinfaktors

(BDNF) im Hippocampus zurück. Dadurch können die kognitiven Fähigkeiten des Gehirns verbessert werden. Die molekulare Charakterisierung des dafür verantwortlichen Signalmechanismus ist Gegenstand aktueller Forschung unseres Labors.



Our studies suggest that the genetic enhancement of H-Ras-MAPkinase signaling in adult neurons affects the generation and dendritic differentiation of newborn cells within the adult hippocampus. Neurogenesis is down-regulated at an early stage of the proliferative cascade altering the pool of young highly plastic cells that are critical for hippocampus-dependent learning and memory. Accordingly, synRas mice display impairments in spatial short-term memory and object recognition. Neurogenesis as well as object recognition can be restored by voluntary exercise supporting a link between neurogenesis and hippocampus-dependent cognition. Young neurons might be necessary especially under conditions requiring increasing demands to associate stimuli over time and/or space

Raphael Stoll

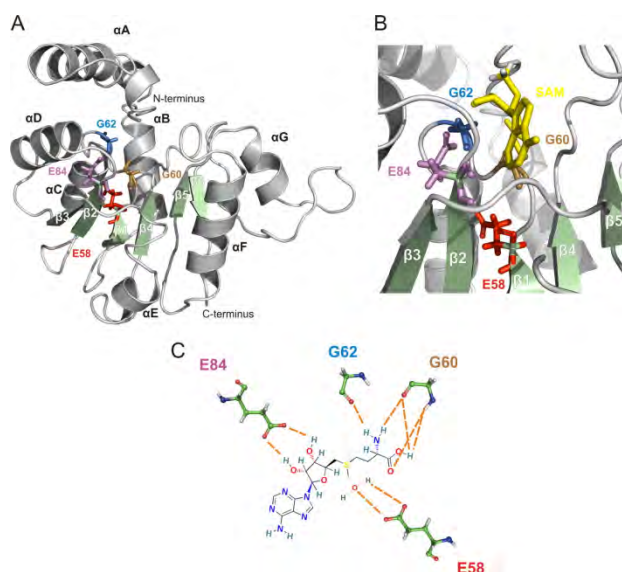
Biochemie II, Biomolekulare NMR-Spektroskopie;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: Raphael.Stoll@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/bionmr>

M. Aktas, J. Gleichenhagen, R. Stoll, F. Narberhaus, *J. Bacteriology* **193** (2011) 3473-3481.
S-adenosylmethionin-binding properties of a bacterial phospholipid N-methyltransferase



Für eine Vielzahl von Interaktionen zwischen Mikroben und ihren Wirten ist das Membranlipid Phosphatidylcholin (PC) bei Bakterien von großer Wichtigkeit. Die Phospholipid N-methyltransferase PmtA des Pflanzenpathogens *Agrobacterium tumefaciens* katalysiert die Bildung des PC in einer dreistufigen Methylierung ausgehend von Phosphatidylethanolamin. Die Methylgruppe stammt dabei vom S-Adenosyl-Methionin (SAM), das dabei zu in S-Adenosyl-Homocystein (SAH) umgesetzt wird. Bisher ist allerdings nur wenig über den molekularen Mechanismus dieses Enzymes bekannt. Alaninsubstitutionen der für die SAM-Bindung voraus-

gesagten Aminosäuren E58, G60, G62 und E84 der PmtA aus *A. tumefaciens* führten zu einer drastischen Reduktion der SAM-Bindung und zu einer verminderten Enzymaktivität. Mittels kernmagnetischer Resonanztitrationsstudien (NMR) sowie ^{14}C -SAM-Bindungsstudien konnten Bindungskonstanten der PmtA für SAM und SAH im mikromolaren Bereich bestimmt werden. Unsere Studien liefern somit erste Einblicke in die Struktur und SAM-Bindungseigenschaften einer bakteriellen Phospholipid N-Methyltransferase.

The presence of the membrane lipid phosphatidylcholine (PC) in the bacterial membrane is critically important for many host-microbe interactions. The phospholipid N-methyltransferase PmtA from the plant pathogen *Agrobacterium tumefaciens* catalyzes the formation of PC by a three-step methylation of phosphatidylethanolamine via monomethylphosphatidylethanolamine and dimethylphosphatidylethanolamine. The methyl group is provided by S-adenosylmethionine (SAM), which is converted to S-adenosylhomocysteine (SAH) during transmethylation. Despite the biological importance of bacterial phospholipid N-methyltransferases, little is known about amino acids critical for binding to SAM or phospholipids and catalysis. Alanine substitutions in the predicted SAM-binding residues E58, G60, G62, and E84 in *A. tumefaciens* PmtA dramatically reduced SAM-binding and enzyme activity. Homology modeling of PmtA satisfactorily explained the mutational results. The enzyme is predicted to exhibit a consensus topology of the SAM-binding fold consistent with cofactor interaction as seen with most structurally characterized SAM-methyltransferases. Nuclear magnetic resonance (NMR) titration experiments and ^{14}C -SAM-binding studies revealed binding constants for SAM and SAH in the low micromolar range. Our study provides first insights into structural features and SAM binding of a bacterial phospholipid N-methyltransferase.

Katrin Sommer

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

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

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

R. Wieczorek, K. Sommer, *J. Chem. Ed.* **88** (2011) 4, 468-469. Demonstrating the Antioxidative Capacity of Substances with Lightsticks.

In dem Beitrag wird ein einfaches, zuverlässiges und kostengünstiges Experiment beschrieben, mit dem die antioxidative Wirkung von Substanzen demonstriert werden kann. Dabei kommen Lightsticks zum Einsatz. Nach der „Aktivierung“ des Lightsticks kommt es durch die Reaktion von Wasserstoffperoxid mit Oxalsäurediphenylester zur Chemolumineszenz (vgl. Abb. 1, links). Setzt man antioxidativ wirkende Substanzen, wie Ascorbinsäure oder Flavonoide (z.B. Naringin) zu, so nimmt die Intensität der Lumineszenz deutlich ab (vgl. Abb. 1, rechts).

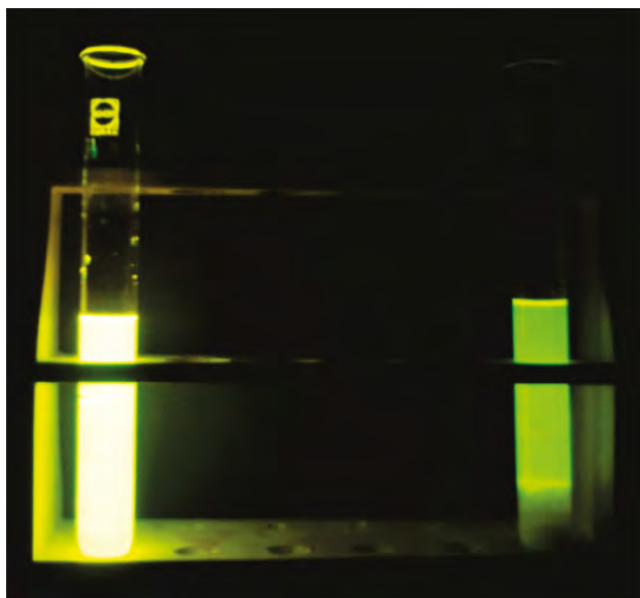


Abb. 1: Kontrollansatz mit Natriumchlorid (links) und Ansatz mit der antioxidativ wirkenden Substanz Naringin (rechts). Two test tubes after the addition of a control or test substance: (left) sodium chloride control and (right) naringin.

This article describes a simple, reliable and inexpensive procedure to qualitatively demonstrate the antioxidative capacity using the well discussed and impressive chemoluminescence reaction of lightsticks. When a lightstick is snapped it shows a bright chemoluminescence. This luminescence results from the reaction of the hydrogen peroxide (from the glass vial in the lightstick) with the phenyl oxalate ester (in the plastic tube).

After the addition of the test substance (= antioxidant ingredients, e.g., ascorbic acid or flavonoids such as naringin), the light intensity of the batch shows an obvious decay compared to the blank test, which shows the normal luminescence of a lightstick (Figure 1). The observed decay of the light intensity after the addition of the assay can be traced back to its antioxidative capacity.

Forscherguppe 630 "Biologische Funktion von Organometallverbindungen"

Sprecher: Nils Metzler-Nolte

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: Nils.Metzler-Nolte@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/for630/>

Die *Bioorganometallchemie* ist ein aktuelles, interdisziplinäres Arbeitsgebiet. Diese Forschergruppe hat das Ziel, die Organometallchemie in der medizinischen Chemie zu etablieren. Der wissenschaftliche Schwerpunkt der Forschergruppe zielt auf das umfassende Verständnis der Wechselwirkung ausgewählter Klassen von Organometallverbindungen mit ihren zellulären Zielstrukturen wie Rezeptoren, Proteinen und DNA. Dabei sollen metallspezifische Wirkmechanismen aufgeklärt werden. Diese Erkenntnisse fließen in das Design neuer Leitstrukturen ein und tragen zum Verständnis von Signalwegen und Proteinexpressionsmustern in Tumorzellen bei. Die neun teilnehmenden Gruppen in dieser von der DFG seit 2006 geförderten ortsverteilten Forschergruppe haben im Jahr 2011 wieder über zehn gemeinsame Publikationen veröffentlicht. In Bochum sind an der FOR630 die Gruppen Sheldrick (Analytische Chemie) und Metzler-Nolte (Anorg. Chemie I) beteiligt. Frau Dr. Ines Neundorff, Teilprojektleiterin (Uni Leipzig), hat im Jahr 2011 einen Ruf auf eine Professur für Biochemie an der Universität zu Köln angenommen, Prof. Ronald Gust (FU Berlin) hat einen Ruf an die Universität Innsbruck angenommen. Die Förderung der FOR 630 läuft im Jahr 2012 aus.



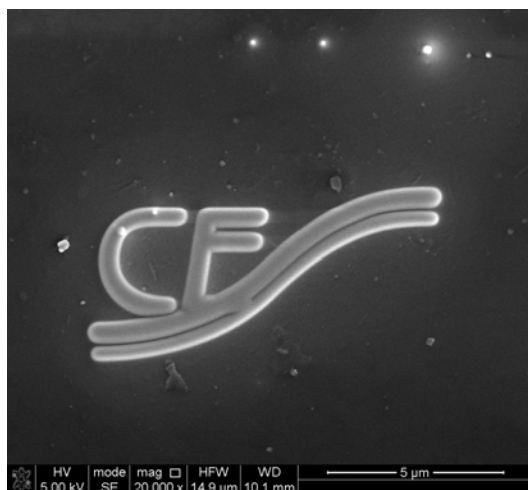
Bioorganometallic Chemistry is a young and interdisciplinary field of study. This Research Unit ("Forscherguppe") will establish organometallic chemistry as part of medicinal chemistry. Funding for this Research Unit by the German Funding Agency (DFG) started in 2006 and is expected to run until the middle of 2012. Selected classes of organometallic compounds will be studied in their interaction with cellular components like receptors, proteins, peptides and DNA. We are aiming to identify metal-specific mechanisms of cytotoxicity. The findings will guide the design of novel metal-based lead structures and contribute to the understanding of signalling pathways and protein expression patterns. In 2011, more than ten joint papers were published from this Research Unit. Progress in this Research Unit will contribute to the development of medicinal bioorganometallic chemistry in Germany and beyond. Funding of FOR 630 will end in 2012.

Zentrum für Elektrochemie
Center for Electrochemical Sciences (CES)

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

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

Nach seiner Gründung im Oktober 2009 ist CES im Jahr 2011 vollständig eingerichtet und Forschungsarbeiten auf unterschiedlichsten Gebieten der Elektrochemie werden durchgeführt. Hierfür steht ein Elektrochemie-Labor ausgerüstet mit hochmodernen Elektrochemie-, Mikroskopie-, und Spektroskopietechniken zur Verfügung. Die Arbeitsgruppen der Sprecher sowie drei Nachwuchsgruppen "Molecular Nanostructures" (Dr. Nicolas Plumere), "Semiconductor Electrochemistry and Energy Conversion" (Dr. Fabio La Mantia) und "Adsorption and Electrocatalysis" (Dr. Aliaksandr Bandarenka) arbeiten mit 15 Postdoktoranden/innen, 11 Doktoranden/innen und einer Reihe von Masterstudierenden an aktuellen Themen wie Li-Ionen-Batterien, Halbleiter, Photoelektrochemie, photoelektrochemische Wasserspaltung, Katalysatoren für die Sauerstoff-Reduktion/Oxidation, Brennstoffzellen und Biosensoren. Die umfangreichen experimentellen Untersuchungen werden begleitet von Methodenentwicklung sowie Studien im Bereich der theoretischen Elektrochemie. Die Arbeiten wurden auf einer Reihe von nationalen und internationalen Konferenzen vorgestellt und sind bereits in mehr als 20 Publikationen dokumentiert.



After its foundation in October 2009 CES is now completed and fully operational. The core of CES is a central electrochemistry laboratory equipped with modern electrochemical-, microscopic- and spectroscopic techniques. The research groups of the two speakers supported by three junior research groups "Molecular Nanostructures" (Dr. Nicolas Plumere), "Semiconductor Electrochemistry and Energy Conversion" (Dr. Fabio La Mantia) and "Adsorption and Electrocatalysis" (Dr. Aliaksandr Bandarenka) work together with 15 post-docs, 11 PhD students and several master students on a broad range of electrochemical topics like Li-ion-batteries, semiconductors, photoelectrochemistry, photoelectrochemical water

splitting, catalysts for oxygen reduction/oxidation, fuel cells, and biosensors. The experimental studies are completed by development of new sophisticated electrochemical methods as well as theoretical electrochemistry. The results of the scientific studies have already been presented on various national and international conferences and are published in more than 20 peer-reviewed scientific papers.

Research Department Interfacial Systems Chemistry (RD IFSC)

RD IFSC; NC02/168; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email:anja.mudring@rub.de, sabine.borgmann@rub.de;

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

RESEARCH DEPARTMENT Interfacial Systems Chemistry



Das Research Department Interfacial Systems Chemistry (RD IFSC) hat sich der Einrichtung von interdisziplinären Forschungsprojekten verschrieben. 2011 stand ganz im Zeichen der Akquise von Forschungsverbünden. Ein wichtiger Meilenstein war der Vollartrag für einen neuen Forschungsbau für ein „Zentrum für molekulare Spektroskopie und Simulation solvensgesteuerter Prozesse“ (ZEMOS; www.rub.de/zemos). Das Projekt wurde vom Wissenschaftsrat zur Förderung empfohlen und im November 2011 mit einem Fördervolumen von 44 Mio. € bewilligt. Desweiteren wurden die Vollarträge der RUB zur Exzellenzinitiative maßgeblich aus dem RD IFSC unterstützt und getragen: Der Exzellenzcluster „RESOLV“, an dem Wissenschaftler aus Chemie, Biochemie und Ingenieurwissenschaften beteiligt sind, hat die Untersuchung von Solvationsprozessen zum Gegenstand (*Solvation Science*, www.rub.de/solvation). Das RD IFSC ist zusammen mit den anderen Research Departments ein essentieller Baustein des Research Campus RUB.

Im August 2011 hat Prof. Dr. M. Havenith-Newen ihre Sprecherinfunktion an Prof. A.-V. Mudring übergeben. Als neue Mitglieder wurden in 2011 folgende Wissenschaftler aufgenommen: Prof. Dr. K. Morgenstern, Prof. Dr. M. Wark, JP Dr. R. Beránek, JP Dr. S. Ebbinghaus, Dr. Ch. Müller, Dr. N. Plumeré, Dr. F. La Mantia, Dr. A. Bandarenka, Dr. S. Kareth und Dr. J. Strunk. Mit der Aufnahme von 8 Nachwuchswissenschaftlern/innen zeigt das RD IFSC ganz klar, dass die Förderung von jungen Wissenschaftlern/innen höchste Priorität hat. Das Department Management hat Dr. S. Borgmann im März 2011 übernommen und unterstützt so auch den neuen Masterstudiengang „Molecular Sciences and Simulation“ (www.rub.de/imos). Das IFSC Praktikum wurde optimiert und koordiniert von Prof. A. Devi.

Als wissenschaftliche Bilanz wurden über 20 Anträge für Forschungsprojekte von den Mitgliedern des RD IFSC gestellt. Die internationalen Forschungs Kooperationen wurden erfolgreich erweitert und ausgebaut. Im Forschungskontext des RD IFSC wurden 117 Publikationen, davon 21 als gemeinschaftliche Veröffentlichungen, generiert. Es wurden in 2011 über 15 Preise bzw. Auszeichnungen an Mitglieder des RD IFSC verliehen.

2001 the Research Department Interfacial Systems Chemistry (RD IFSC) has focussed on establishing large collaborative projects. A milestone was the full proposal for a new research building, ZEMOS, a centre for molecular spectroscopy and simulation of solvent-directed processes (www.rub.de/zemos) which was positively evaluated by the German Research Council and now receives 44 Mio. € funding. The RD IFSC also supported the RUB participation in the excellence initiative such as in the excellence cluster „RESOLV“ which is occupied with investigating solvation processes in chemistry, biochemistry and engineering sciences (*Solvation Science*, www.rub.de/solvation). Together with the other RUB Research Departments the RD IFSC has become an integral part of the Research Campus RUB in bringing researchers and their activities together across scientific disciplines and faculties.

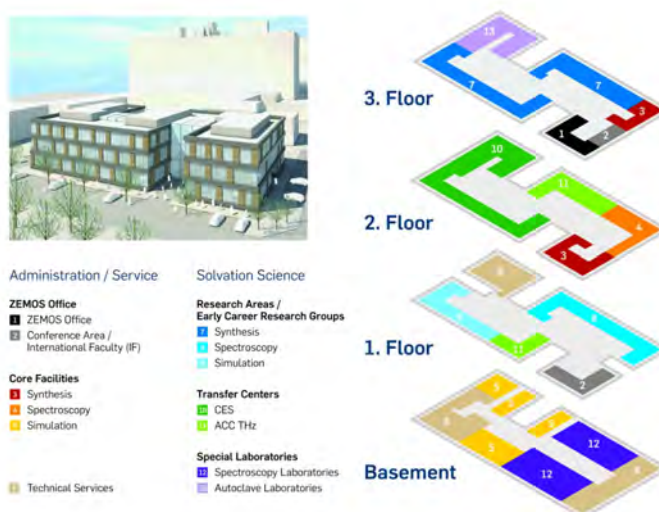
The success of the RD IFSC is documented by the more than 100 publications in peer-reviewed journals of its members. 15 awards were received by established RD members and 10 new numbers, amongst them 8 young talents, were elected as new members.

ZEMOS

Zentrum für Molekulare Spektroskopie und Simulation solvensgesteuerter Prozesse **Sprecherin: Martina Havenith**

Die meisten chemischen Reaktionen, wichtige industrielle Prozesse und nahezu alle biologischen Vorgänge finden in flüssiger Phase statt. Lösungsmittel – mit Wasser als bekanntestem Beispiel – „solvatisieren“ vom elektrisch geladenen Atom (Ion) über einfache Moleküle bis hin zum hochmolekularen Proteinkomplex unterschiedlichste Teilchen und bringen diese so in die flüssige Phase. Lösungsmittel („Solventien“) können zudem ausgedehnte Oberflächen benetzen und Grenzflächen ausbilden. Die Erlangung eines tiefgreifenden Verständnisses der Solvation auf Basis chemischer, (bio-)physikalischer und ingenieurwissenschaftlicher Grundlagenforschung ist ein hochaktuelles Forschungsgebiet und die Voraussetzung für die Entwicklung gesellschaftlich relevanter Schlüsseltechnologien a) zur Vermeidung von Umweltbelastungen (z.B. umweltverträgliche Gastrennverfahren) b) zur Verbesserung der Energieeffizienz (z.B. Entwicklung von Batterien mit längeren Standzeiten und höheren Kapazitäten) und c) für ein Verständnis der Rolle des wässrigen Mediums für wichtige biologische Funktionen (z.B. Proteinfaltung, enzymatische Reaktionen oder Fibrillenbildung).

Mit dem Forschungsbau ZEMOS wird ein national einzigartiges und international herausragendes Zentrum für Solvation Science an der RUB errichtet werden. Forscher der Ruhr-Universität Bochum (RUB) sowie der Max-Planck-Institute (MPI) für Kohlenforschung (Mülheim/Ruhr) und für Eisenforschung (Düsseldorf) nehmen auf diesem Gebiet eine internationale Spitzenposition ein. Der Forschungsbau dient dazu, diesen Vorsprung gezielt weiter auszubauen und Möglichkeiten zu schaffen, die über die jetzt in den einzelnen Arbeitsgruppen verfügbaren weit hinausgehen. Im Zuge einer strategischen Ausrichtung der RUB werden daher folgende Schritte unternommen: 1. Es werden 4 Professuren für die Forschung im Bereich Solvation Science eingerichtet, für die erst mit dem Forschungsbau ZEMOS die erforderlichen Arbeitsbedingungen geschaffen werden. 2. Als direkte Schnittstelle zwischen Grundlagenforschung und technischer Anwendung im Bereich Solvation Science wurden zwei neue Zentren an der RUB eingerichtet: das Center of Electrochemical Sciences (CES) und das Applied Competence Center Terahertz (ACC THz). 3. ZEMOS dient gezielt dazu, die Nachwuchsförderung im Bereich Solvation Science weiter auszubauen.



Veröffentlichungen 2011

Anorganische Chemie 1

- G. Gasser, A. M. Sosniak, N. Metzler-Nolte, *Dalton Trans.* **40** (2011) 7061-7076. Metal-containing peptide nucleic acid conjugates
- G. Gasser, I. Ott, N. Metzler-Nolte, *J. Med. Chem.* **54** (2011) 3-25. Organometallic Anticancer Compounds
- G. Gasser, I. Ott, N. Metzler-Nolte, Chapter 12 in *Medicinal Inorganic Chemistry* (Editor: Enzo Alessio, ISBN-13: 978-3-527-32631-0) Wiley-VCH, Weinheim (2011), Metal Complexes as Enzyme Inhibitors
- N. S. Hüsken, M. Gebala, F. La Mantia, W. Schuhmann, N. Metzler-Nolte, *ChemPhysChem* **13** (2012) 131-139. Impact of Single Basepair Mismatches on Electron-Transfer Processes at Fc-PNA•DNA Modified Gold Surfaces
- M. R. Malik, V. Vasylyeva, K. Merz, N. Metzler-Nolte, M. Saleem, S. Ali, A. A. Isab, K. S. Munawar, S. Ahmad, *Inorg. Chim. Acta* **376** (2011) 207-211. Synthesis, crystal structures, antimicrobial properties and enzyme inhibition studies of zinc(II) complexes of thiones
- J. Zagermann, A. Deally, N. Metzler-Nolte, H. Müller-Bunz, D. Wallis, M. Tacke, *Polyhedron* **30** (2011) 2387–2390. Towards peptide-substituted titanocene anticancer drugs
- G. Gasser, S. Neumann, I. Ott, M. Seitz, R. Heumann, N. Metzler-Nolte, *Eur. J. Inorg. Chem.* **36** (2011) 5471–5478. Preparation and Biological Evaluation of Di-Hetero Organometallic-Containing PNA Bioconjugates
- M. Patra, N. Metzler-Nolte, *Chem. Commun.* **47** (2011) 11444-11446. Azidomethyl-ruthenocene: Facile Synthesis of a Useful Metallocene Derivative and its Application in the ‘Click’ Labelling of Biomolecules
- S. Nawaz, A. A. Isab, K. Merz, V. Vasylyeva, N. Metzler-Nolte, M. Saleem, S. Ahmad, *Polyhedron* **30** (2011) 1502-1506. Synthesis, characterization and antimicrobial studies of mixed ligand silver(I) complexes of triphenylphosphine and heterocyclic thiones: Crystal structure of bis[{(μ²-diazinane-2 thione)(diazinane-2-thione)(triphenylphosphine)silver(I) nitrate}]
- N.S. Hüsken, M. Gebala, F. La Mantia, W. Schuhmann, N. Metzler-Nolte, *Chem. Eur. J.* **17** (2011) 9678–9690. Mechanistic Studies of Fc-PNA(•DNA) Surface Dynamics Based on the Kinetics of Electron-Transfer Processes
- T. Kikuchi, R. Kasuya, S. Endo, A. Nakamura, T. Takai, N. Metzler-Nolte, K. Tohji, J. Balachandran, *J. Magnetism Magn. Materials* **323** (2011) 1216-1222. Preparation of magnetite aqueous dispersion for magnetic fluid hyperthermia
- I. C. Henao Castañeda, S. E. Ulic, C. O. Della Védova, N. Metzler-Nolte, J. L. Jios, *Tetrahedron Lett.* **52** (2011) 1436-1440. One-pot synthesis of 2-trifluoromethylchromones
- M. Patra, G. Gasser, M. Wenzel, K. Merz, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2011) 3295–3302. Synthesis of Optically Active Ferrocene-containing Platensimycin Derivatives with a C6-C7 Substitution Pattern

- G. Gasser, A. M. Sosniak, A. Leonidova, H.k Braband, N. Metzler-Nolte, *Aust. J. Chem.* **64** (2011) 265-272. Towards the Preparation of novel Re/^{99m}Tc Tricarbonyl-Containing Peptide Nucleic Acid Bioconjugates
- M. Wenzel, M. Patra, D.k Albrecht, D. Y.-K. Chen, K. C. Nicolaou, N. Metzler-Nolte, J. E. Bandow, *Antimicrob. Agents Chemother.* **55** (2011) 2590-2596. Proteomic Signature of Fatty Acid Biosynthesis Inhibition Available for *in vivo* Mechanism of Action Studies
- J. Zagermann, K. Merz, N. Metzler-Nolte, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **637** (2011) 1277-1279. The Structure of the "Third-Generation" Tris(pyrazolyl)borate Caesium Salt p-BrC₆H₄TpCs
- L. Raszeja, A. Maghnouj, S. Hahn, N. Metzler-Nolte, *ChemBioChem* **12** (2011) 371-376. A Novel Organometallic Re(I) Complex with Favourable Properties for Bioimaging and Applicability in Solid Phase Peptide Synthesis
- M. Ma, A. Gross, D. Zacher, A. Pinto, H. Noei, Y. Wang, R. A. Fischer, N. Metzler-Nolte, *Cryst. Eng. Comm.* **13** (2011) 2828-2832. Use of Confocal Fluorescence Microscopy to Compare Different Methods of Modifying Metal-Organic Framework (MOF) Crystals with Dyes
- B. Liu, M. Ma, D. Zacher, A. Betard, K. Yussenko, N. Metzler-Nolte, C. Wöll, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011) 1734-1737. Chemistry of SURMOFs: Layer selective installation of functional groups and post-synthetic covalent modification probed by fluorescence microscopy
- J. Zagermann, M. Molon, N. Metzler-Nolte, *Dalton Trans.* **40** (2011) 1011-1015. Microwave-assisted Synthesis of the Tp Sandwich Compound TpRu(p-Br-C₆H₄Tp) and Application of its Benzoic Acid Derivative TpRu(p-(CO₂H)-C₆H₄Tp) in the Covalent Labelling of Biomolecules. - Selected for Cover Picture of the Issue -
- M. Ma, D. Zacher, X. Zhang, R. A. Fischer, N. Metzler-Nolte, *Crystal Growth & Design* **11** (2011) 185-189. A Method for the Preparation of Highly Porous, Nanosized Crystals of Isorecticular Metal-Organic Frameworks
- A. Groß, M. Neukamm, N. Metzler-Nolte, *Dalton Trans.* **40** (2011) 1382-1386. Synthesis and Cytotoxicity of a Bimetallic Ruthenocene Dicobalt-hexacarbonyl-alkyne Peptide Bioconjugate
- J. Lemke, N. Metzler-Nolte, *J. Organomet. Chem.* **696** (2011) 1018-1022. Organometallic Peptide NHC complexes of Cp* Rh(III) and Arene Ru(II) moieties from L-thiazolylalanine
- J. Zagermann, K. Klein, K. Merz, M. Molon, N. Metzler-Nolte, *Eur. J. Inorg. Chem.* **30** (2011) 4212-4219. Synthesis and Characterization of the Azido-Functionalized Ruthenocene Analogue [Tp^mRu(p-N₃C₆H₄)Tp]Cl and Its Attachment to Biomolecules by Copper-Catalyzed Azide-Alkyne Cycloaddition
- T. Backer, O. Breunig, M. Valldor, K. Merz, V. Vasylyeva, A.-V. Mudring, *Crystal Growth & Design* **11** (2011) 2564-2571. Language: English, Database: CAPLUS, DOI:10.1021/cg200326n. In-Situ Crystal Growth and Properties of the Magnetic Ionic Liquid [C₂mim][FeCl₄]

- M. Kanthak, A. Aniol, , M. Nestola, K. Merz, I. M. Oppel, G. Dyker, *Organometallics* **30** (2011) 215-229. Language: English, Database: CAPLUS, DOI:10.1021/om 100727d. Chelated Ruthenium Complexes of Functionalized Pentaarylcyclopentadienes
- C. Doffek, N. Alzakhem, M. Molon, M. Seitz, *Inorg. Chem.* **51** (2012) 4539-4545. Rigid, Perdeuterated Lanthanoid Cryptates – Extraordinarily Bright Near-IR Lumino-phores
- G. Gasser, A. Pinto, S. Neumann, A. M. Sosniak, M. Seitz, K. Merz, R. Heumann, N. Metzler-Nolte, *Dalton Trans.* **41** (2012) 2304-2313. Synthesis, Characterisation and Bioimaging of a Fluorescent Rhenium-Containing PNA Bioconjugate
- P. Ghosh, S. Tang, A.-V. Mudring, *J. Mat. Chem.* **21** (2011) 8640. Efficient quantum cutting in hexagonal NaGdF₄:Eu³⁺ nanorods (HOT Article)
- C. Lorbeer, J. Cybinska, E. Zych, A.-V. Mudring, *ChemSusChem* **4** (2011) 595. Ionic liquid based synthesis – a low temperature route to nanophosphates
- C. Lorbeer, J. Cybinska, E. Zych, A.-V. Mudring, *Opt. Mat.* **34** (2011) 336. Highly doped alkaline earth nanofluorides synthesized from ionic liquids
- C. Lorbeer, J. Cybinska, A.-V. Mudring, *Cryst. Growth & Des.* **11** (2011) 1040. Europium(III) Fluoride Nanoparticles from Ionic Liquids: Structural, morphological and luminescent properties
- T. Alammari, A.-V. Mudring, *ChemSusChem* **4** (2011) 1796. Sonochemical Synthesis of 0D-, 1D- and 2D-Nano-Zinc Oxide in Ionic Liquids and its Photocatalytic Activity
- K. Richter, A. Birkner, A.-V. Mudring, *PCCP* **13** (2011) 7136. Stability and growth behavior of transition metal nanoparticles in ionic liquids prepared by thermal evaporation: How stable are they really?
- T. Bäcker, O. Breunig, M. Valldor, K. Merz, V. Vasilieva, A.-V. Mudring, *Cryst. Growth & Des.* **11** (2011) 2564. In-situ crystal growth and properties of the magnetic ionic liquid [C₂mim][FeCl₄]
- G. Wang, A.-V. Mudring, *Crystals*, **1** (2011) 22. KFe[BP₂O₈(OH)], A New Open-Framework Iron Borophosphate from Ionic Liquids.
- J. Bäcker, S. Mihm, B. Mallick, G. Meyer, A.-V. Mudring, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2011) 4089. Crystalline and Liquid Crystalline Organic-Inorganic Hybrid Salts with Cation Sensitized Hexanuclear Molybdenum Cluster Complex Anion Luminescence
- A. Getsis, A.-V. Mudring, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2011) 3217. Switchable Green and White Luminescence in Terbium-based Ionic Liquid Crystals
- S. Tang, A.-V. Mudring, *Cryst. Growth & Des.* **11** (2011) 1437. Ionic liquids as Crystallization Media: Weakly-Coordinating Anions Do Coordinate in ¹_∞[Eu(OTf)₃(CH₃CN)₃]
- M. Larres, A.-V. Mudring, G. Meyer, *Crystals* **1** (2011) 15. The First Lanthanide Telluride-Bromide: La₃Te₄Br, a Valence Compound
- J. Beekhuizen, A.-V. Mudring, Gerd Meyer, *Crystals* **1** (2011) 40. Linear Trimeric Hafnium Clusters in Hf_{0.86}I₃

- M. Brühmann, A.-V. Mudring, M. Valldor, Gerd Meyer, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2011) 4083. $\{\text{Os}_5\text{Lu}_{20}\}\text{I}_{24}$, the First Extended Cluster Complex of Lutetium with Eight-Coordinate Endohedral Osmium Atoms in Two Different Environments
- C. Fiolka, M. Richter, I. Pantenburg, A.-V. Mudring, G. Meyer, *Crystals* **1** (2011) 220. $(\text{B}15\text{c}5)\text{BiI}_3(\text{I}_2)$: Molecular Benzo-15-crown5— BiI_3 Complexes Bridged by Iodine Molecules to Chains
- M. Hellwig, H. Parala, J. Cybinksa, D. Barreca, A. Gasparotto, B. Niermann, H.-W. Becker, D. Rogalla, J. Feydt, S. Irsen, A.V. Mudring, J. Winter, R. A. Fischer, A. Devi, *J. Nanoscience and Nanotechnol.* **11** (2011) 8094. Atomic vapor deposition approach to In_2O_3 thin films
- R. Starosta, M. Puchalska, J. Cybinska, M. Barys, A.-V. Mudring, *Dalton Trans.* **40** (2011) 2459. Structures, electronic properties and solid state luminescence of Cu(I) iodide complexes with 2,9-dimethyl-1,10-phenanthroline and aliphatic aminomethylphosphines or triphenylphosphine

Anorganische Chemie 2

- Bo Liu, R. A. Fischer, *Science Chemistry China* **54** (2011) 1851-1866. Liquid-Phase Epitaxy of Metal Organic Framework Thin Films.
- Gasparotto, D. Barreca, D. Bekermann, A. Devi, R. A. Fischer, P. Fornasiero, V. Gombac, O. I. Lebedev, C. Maccato, T. Montini, G. Van Tendeloo, E. Tondello, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011) 19362-19365. F-Doped Co_3O_4 Photocatalysts for Sustainable H_2 Generation from Water/Ethanol.
- Q. Simon, D. Barreca, D. Bekermann, D. Gasparotto, C. Maccato, E. Comini, V. Gombac, P. Fornasiero, O.I. Lebedev, S. Turner, A. Devi, R. A. Fischer, G. Van Tendeloo, *Int. J. Hydrogen Energy* **36** (2011) 15527-15537. Plasma-assisted synthesis of Ag/ZnO nanocomposites: first example of photo-induced H_2 production and sensing.
- D. Bekermann, A. Gasparotto, D. Barreca, A. Devi, R. A. Fischer, *Surface Science Spectra* **18** (2011) 36-45. p- $\text{Co}_3\text{O}_4/\text{n-ZnO}$, obtained by PECVD, analyzed by X-ray Photoelectron Spectroscopy.
- H. K. Arslan, O. Shekhah, J. Wohlgemuth, M. Franzreb, R. A. Fischer, C. Wöll, *Adv. Funct. Mater.* **21** (2011) 4228–4231. High-Throughput Fabrication of Uniform and Homogenous MOF Coatings.
- T. Bollermann, I. Schwedler, M. Molon, K. Freitag, C. Gemel, R. W. Seidel, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* **40** (2011) 12570-12577. Zinc-rich compounds of iron and cobalt: Formation of $[\text{Fe}_2\text{Zn}_n]$ ($n = 2-4$) and $[\text{Co}_2\text{Zn}_3]$ core.
- D. Esken, S. Turner, C. Wiktor, S. B. Kalidindi, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011) 16370-16373. GaN@ZIF-8: Selective formation of gallium nitride quantum dots inside a zinc methylimidazolate framework.
- T. Bollermann, K. Freitag, C. Gemel, M. Molon, R. W. Seidel, M. von Hopffgarten, P. Jerabek, G. Frenking, and R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **50** (2011) 10486.10492. The rich chemistry of $[\text{Zn}_2\text{Cp}^*_2]$: Trapping three different types of zinc ligands in the unusual PdZn_7 complex $[\text{Pd}(\text{ZnCp}^*)_4(\text{ZnMe})_2(\text{Zn}\{\text{tmeda}\})]$.

- T. Bollermann, K. Freitag, C. Gemel, R. W. Seidel, R. A. Fischer, *Organometallics* **30** (2011) 4123-4127. Reactivity of $[\text{Zn}_2\text{Cp}^*_2]$ towards Transition Metal Complexes: Synthesis and Characterisation of $[\text{Cp}^*\text{M}(\text{ZnCp}^*)_3]$ (M = Ni, Pd, Pt).
- D. Gasparotto, D. Barreca, D. Bekermann, A. Devi, R. A. Fischer, C. Maccato, E. Tondello, *J. Nanosci. Nanotechnol.* **11** (2011) 8206–8213. Plasma Processing of Nanomaterials: Emerging Technologies for Sensing and Energy Applications.
- D. Barreca, D. Bekermann, E. Comini, A. Devi, R. A. Fischer, D. Gasparotto, M. Gavagnin, C. Maccato, C. Sada, G. Sberveglieri, E. Tondello, *Sensors & Actuators: B. Chemical* **160** (2011) 79- 86. Plasma Enhanced-CVD of undoped and fluorine-doped Co_3O_4 nanosystems for novel gas sensors.
- M. Hellwig, H. Parala, J. Cybinksa, D. Barreca, D. Gasparotto, B. Niermann, H.-W. Becker, D. Rogalla, J. Feydt, S. Irsen, A.V. Mudring, J. Winter, R. A. Fischer, A. Devi, *J. Nanosci. Nanotechnol.* **11** (2011) 8094-8100. Atomic Vapor Deposition Approach to In_2O_3 Thin Films.
- M. Molon, C. Gemel, M. von Hopffgarten, Moritz; G. Frenking, R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **50** (2011) 12296-302. Molecular Hume Rothery Compounds $[\text{M}(\text{ZnR})_n]$ and $[\text{M}(\text{ZnR})_a(\text{GaR})_b]$ ($a+2b = n \geq 8$): Relations of Coordination Polyhedra and Electronic Structure.
- S. Henke, F. Wieland, R. A. Fischer, *CrystEngCommun.* **13** (2011) 6399-6404. Multiple Phase-Transitions upon Selective CO_2 Adsorption in an Alkyl Ether Functionalized Metal-Organic Framework – An In Situ X-Ray Diffraction Study.
- H. K. Arslan, O. Shekhah, D.C. F. Wieland, M. Paulus, C. Sternemann, M. A. Schroer, S. Tiemeyer, M. Tolan, R. A. Fischer, and C. Wöll, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011), 8158-8161. Intercalation in Layered Metal–Organic Frameworks: Reversible Inclusion of an Extended π -System.
- T. Bollermann, T. Cadenbach, C. Gemel, K. Freitag, M. Molon, V. Gwildies, R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **50** (2011) 5808-5814. Homoleptic Hexa and Penta Gallylene Coordinated Complexes of Molybdenum and Rhodium.
- M. Molon, T. Bollermann, C. Gemel, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* **40** (2011) 10769-10774. Mixed phosphine and group-13 metal ligator complexes $[(\text{PR}_3)_a\text{M}(\text{ECp}^*)_b]$ (M = Mo, Ni; E = Ga, Al; R = C_6H_5 , cyclo- C_6H_{11}).
- O. Kozachuk, K. Yussenko and R. A. Fischer, *Chem. Commun.* **47** (2011) 8509–8511. Solvothermal growth of the HKUST-1 analogue $[\text{Ru}_3(\text{btc})_2]$ as thin films on oxide surfaces.
- Doddi, C. Gemel, R. W. Seidel, M. Winter, R. A. Fischer, *J. Organomet. Chem.* **696** (2011) 2635-2640. Synthesis and Structure of New Compounds with Pt-Ga Bonds: Insertion of the bulky Gallium (I) Bisimidinate $\text{Ga}(\text{DDP})$ into Pt-Cl bond.
- S. B. Kalidindi, K. Yussenko, R. A. Fischer., *Chem. Commun.* **47** (2011) 8506-8508. Metallocenes@COF-102: Organometallic Host-Guest Chemistry of Porous Crystalline Organic Framework.
- D. Barreca, A. Devi, R. A. Fischer, D. Bekermann, D. Gasparotto, M. Gavagnin, C. Maccato, E. Tondello, E. Bontempi, L. E. Depero, C. Sada, *CrystEngComm.* **13** (2011)

- 3670-3673. Strongly oriented Co_3O_4 thin films on $\text{MgO}(100)$ and $\text{MgAl}_2\text{O}_4(100)$ substrates by PE-CVD.
- S. B. Kalidindi, D. Esken, R. A. Fischer, *Chem. Eur. J.* **17** (2011) 6594-659. B-N chemistry@ZIF-8: dehydrocoupling of dimethylamine-borane at room temperature.
 - D. Bekermann, A. Ludwig, T. Toader, C. Maccato, D. Barreca, A. Gasparotto, C. Bock, A. D. Wieck, U. Kunze, E. Tondello, R. A. Fischer, and A. Devi, *Chem. Vap. Dep.* **17** (2011) 155-161. MOCVD of ZnO films from bis(ketoiminato)Zn(II) precursors: structure, morphology and optical properties.
 - M. Ma, A. Gross, D. Zacher, A. Pinto, H. Noei, Y. Wang, R. A. Fischer, N. Metzler-Nolte, *CrystEngComm.* **13** (2011) 2828-2832. Use of Confocal Fluorescence Microscopy to Compare Different Methods of Modifying Metal-Organic Framework (MOF) Crystals with Dyes.
 - D. Esken, H. Noei, Y. Wang, C. Wiktor, S. Turner, G. Van Tendeloo, R. A. Fischer, *J. Mater. Chem.* **21** (2011) 5907-5915. ZnO@ZIF-8: Stabilization of quantum confined ZnO nanoparticles by a zinc methylimidazolate framework and their surface structural characterization probed by CO_2 adsorption.
 - O. Shekhah, K. Hirai, H. Wang, H. Uehara, M. Kondo, S. Diring, D. Zacher, R. A. Fischer, O. Sakata, S. Kitagawa, S. Furukawa, C. Wöll, *Dalton Trans.* **40** (2011) 4954-4958. MOF-on-MOF Heteroepitaxy: Perfectly oriented $[\text{Zn}_2(\text{ndc})_2(\text{dabco})]_n$ grown on $[\text{Cu}_2(\text{ndc})_2(\text{dabco})]_n$ thin films.
 - M. Meilikhov, K. Yusenko, E. Schollmeyer, C. Mayer, H.-J Buschmann, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* **40** (2011) 4838-4841. Stepwise Deposition of Metal Organic Frameworks on flexible synthetic Polymer Surfaces.
 - M. Müller, S. Turner, O. I. Lebedev, Y. Wang, G. van Tendeloo, R. A. Fischer, *Eur. J. Inorg. Chem.* **12** (2011) 1876–1887. Au@MOF-5 and Au/ MO_x @MOF-5 (M = Zn, Ti; x = 1, 2): Preparation and Microstructure Characterisation.
 - S. Henke, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011) 2064-2067. Gated Channels in a Honeycomb-Like Zinc-Dicarboxylate-Bipyridine Framework with Flexible Alkylether Side Chains.
 - O. Shekhah, J. Liu, R. A. Fischer, C. Wöll, *Chem. Soc. Rev.* **40** (2011) 1081-1106. MOF Thin Films: Existing and Future Applications.
 - M. Ma, D. Zacher, X. Zhang, R. A. Fischer, N. Metzler-Nolte, *Cryst. Growth Des.* **11** (2011) 185-189. A Method for the Preparation of Highly Porous, Nanosized Crystals of Isorecticular Metal-Organic Frameworks.
 - B. Liu, M. Ma, D. Zacher, A. Betard, K. Yusenko, N. Metzler-Nolte, C. Wöll, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011) 1734-1737. Chemistry of SURMOFs: Layer selective installation of functional groups and post synthetic covalent modification probed by fluorescence microscopy.
 - M. Ashour, A. Chemseddine, U. Bloeck, R. A. Fischer, *CrystEngComm.* **13** (2011) 483-488. PbSe Nanocrystal Shape Development: Oriented Attachment at Mild Conditions and Microwave Assisted Growth of Nanocubes.

- T. B. Thiede, M. Krasnopolski, A. P. Milanov, T. de los Arcos, A. Ney, H. W. Becker, D. Rogalla, J. Winter, A. Devi, R. A. Fischer, *Chem. Mater.* **23** (2011) 1430-1440. Evaluation of Homoleptic Guanidinate and Amidinate Complexes of Gadolinium and Dysprosium for MOCVD of Rare-Earth Nitride Thin Films.
- D. Zacher, R. Schmid, C. Wöll, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **50** (2011) 176-199. Surface Chemistry of Metal-Organic Frameworks at the Liquid/Solid Interface: A Perspective.
- T. Bollermann, K. Freitag, C. Gemel, R. W. Seidel, M. von Hopffgarten, G. Frenking, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **50** (2011) 772-77. Chemistry of $[\text{Zn}_2\text{Cp}^*_2]$: Trapping monovalent ZnZnCp^* in the metal rich compounds $[(\text{Pd}, \text{Pt})(\text{GaCp}^*)_a(\text{ZnCp}^*)_{4-a}(\text{ZnZnCp}^*)_{4-a}]$ ($a = 0, 2$)
- D. Zacher, K. Yusenko, A. Bétard, S. Henke, M. Molon, T. Ladnorg, O. Shekhah, B. Schüpbach, T. de los Arcos, M. Krasnopolski, M. Meilikhov, J. Winter, Andreas Terfort, C. Wöll, R. A. Fischer, *Chem. Eur. J.* **17** (2011) 1448-1455. Liquid phase epitaxy of multi-component layer-based porous coordination polymer $[\text{M}(\text{L})(\text{P})_{0.5}]$: Importance of deposition sequence on the oriented growth
- A. P. Milanov, R. W. Seidel, D. Barreca, A. Gasparotto, M. Winter, J. Feydt, S. Irsen, H.-W. Becker, A. Devi, *Dalton Trans.* **40** (2011) 62-78. Malonate complexes of dysprosium: Synthesis, characterization and application for MOCVD of dysprosium containing thin films.
- P. Dudek, R. Schmidt, M. Lukosius, G. Lupina, C. Wenger, A. Abrutis, K. Xu, A. Devi, *Thin Solid Films*, **519** (2011) 5796-5799. Basic investigation of HfO_2 based metal-insulator-metal diodes.
- J. Schwarzkopf, R. Dirsyte, A. Devi, A. Kwasniewski, M. Schmidbauer, G. Wagner, M. Michling, D. Schmeisser, R. Fornari, *Thin Solid Films* **519** (2011) 5754-5759. Influence of Na on the structure of $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ films deposited by liquid-delivery spin MOCVD.
- J. Schwarzkopf, M. Schmidbauer, A. Duk, A. Kwasniewski, S. Bin Anooz, G. Wagner, A. Devi, R. Fomari, *Thin Solid Films*, **520** (2011) 239-244. Growth of epitaxial sodium-bismuth-titanate films by metal-organic chemical vapor phase deposition.
- R. Beranek, *Adv. Phys. Chem.* (2011) doi:10.1155/2011/786759. Experimental methods for the determination of the band edge positions of TiO_2 -based nanomaterials
- M. Bledowski, L. Wang, A. Ramakrishnan, O.V. Khavryuchenko, V.D. Khavryuchenko, P.C. Ricci, J. Strunk, T. Cremer, C. Kolbeck, R. Beranek, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** (2011) 21511-21519. Visible-light photocurrent response of TiO_2 -polyheptazine hybrids: evidence for interfacial charge-transfer absorption
- L. Wang, M. Bledowski, A. Ramakrishnan, R. Beranek, *ECS Trans.* **35** (2011) 173-182. TiO_2 -Polyheptazine Hybrid Photoelectrodes: Dynamics of Photogenerated Holes
- V. S. Vidyarthia, M. Hofmann, A. Savan, K. Sliozberg, D. König, R. Beranek, W. Schuhmann, A. Ludwig, *Int. J. Hydrogen Energ.* **36** (2011) 4724-4731. Enhanced photoelectrochemical properties of WO_3 thin films fabricated by reactive magnetron sputtering

- S. Amirjalayer, M. Tafipolsky, R. Schmid, *J. Phys. Chem. C* **115** (2011) 15133-15139. Exploring Network Topologies of Copper Paddle Wheel Based Metal-Organic Frameworks with a First-Principles Derived Force FieldS. Hertel, M. Wehring, S. Amirjalayer, M. Gratz, J. Lincke, H. Krautscheid, R. Schmid, F. Stallmach, *Europ. Phys. J.-Appl. Phys.* **55** (2011) 20702. NMR studies of benzene mobility in metal-organic framework MOF-5
- S. Hertel, M. Wehring, S. Amirjalayer, M. Gratz, J. Lincke, H. Krautscheid, R. Schmid, F. Stallmach, *Europ. Phys. J.-Appl. Phys.* **55** (2011) 20702. NMR studies of benzene mobility in metal-organic framework MOF-5

Organische Chemie 2

- P. Neuhaus, M. Winkler, W. Sander, *J. Phys. Org. Chem.* **24** (2011) 976-992. EPR Spectroscopic and Computational Characterization of the 2-Dehydro-m-xylylene and 4-Dehydro-m-xylylene
- S. V. Chapyshev, Denis V. Korchagin, M. F. Budyka, T. N. Gavrishova, P. Neuhaus, W. Sander, *J. Phys. Chem. A* **115** (2011) 8419-8425. Strain Effects in Electron Spin Resonance Spectroscopy of Quintet 2,6-Bis(4'-nitrenophenyl)-4-phenylpyridine
- A. Metzelthin, E. Sanchez-Garcia, O. Birer, G. Schwaab, W. Thiel, W. Sander, M. Havenith, *ChemPhysChem* **12** (2011) 2009-2017. Acetylene·Furan Trimer Formation at 0.37 K as a Model for Ultracold Aggregation of Non- and Weakly Polar Molecules
- X. Zeng; H., Beckers, H. Willner, D. Grote, W. Sander, *Chem. Eur. J.* **17** (2011) 3977-3984. The Missing Link: Triplet Fluorocarbonyl Nitrene FC(O)N
- M. Mastalerz, H. J. E. Rivera. I. M. Oppel, G. Dyker, *Chryst. Eng. Comm.* **13** (2011) 3979-3982. Supramolecular single-stranded calix[4]arene helices-towards a crystal engineering approach of homochiral assemblies.
- M. Kanthak, A. Aniol, M. Nestola, K. Merz, I. M. Oppel, G. Dyker, *Organometallics* **30** (2011) 215-229. Chelated Ruthenium Complexes of Functionalized Pentaarylcyclopentadienes.

Physikalische Chemie 1

- P. Bharti, W. Schliebs, T. Schievelbusch, A. Neuhaus, C. David, K. Kock, C. Herrmann, H. E. Meyer, S. Wiese, B. Warscheid, C. Theiss, R. Erdmann, *J. Cell Sci.* **124** (2011) 1759-1768. PEX14 is required for microtubule-based peroxisome motility in human cells
- D. Constantinescu, C. Makbul, A. Koturenkiene, M.B. Lüdemann, C. Herrmann, *Biochemistry* **50** (2011) 10990-11000. Dimerization-induced folding of MST1 SARAH and the influence of the intrinsically unstructured inhibitory domain: low thermodynamic stability of monomer

Physikalische Chemie 2

- M. Havenith, Artikel in *BIOspektrum*, Ausgabe 01/2011. Der THz-Tanz des Wassers mit den Proteinen

- M. Havenith, Artikel in *Nachrichten aus der Chemie* Ausgabe 03/2011. THz-Spektroskopie und Solvatationsdynamik
- A. Gutberlet, G. Schwaab, M. Havenith, *J. Phys. Chem. A*, **115**(23) (2011) 6297–6305. High resolution IR spectroscopy of HDO and its dimers with H₂O in helium nanodroplets
- A. Metzelthin, E. Sánchez-García, Ö. Birer, G. Schwaab, W. Thiel, W. Sander, M. Havenith, *ChemPhysChem* **12** (2011) 2009–2017. Acetylene furan trimer formation at 0.37 K as a model for ultracold aggregation of non- and weakly polar molecules
- M. Krüger, M.-M. Huang, E. Bründermann, H. Weingärtner, M. Havenith, *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology* **1** (1) (2011) 313–320. Combined THz and microwave dielectric spectroscopy of intermolecular interactions in homologous protic ionic liquids
- M. Filimon, I. Kopf, D.A. Schmidt, E. Bründermann, J. Rühle, S. Santer, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** (2011) 11620–11626. Local chemical composition of nanophase-separated polymer brushes
- T.Q. Luong, P.K. Verma, R.K. Mitra, M. Havenith, *Biophys. J.* **101** (4) (2011) 925–933. Do hydration dynamics follow the structural perturbation during thermal denaturation of a protein: A terahertz absorption study (Cover Article)
- F. Ballout, J.-S. Samson, D.A. Schmidt, E. Bründermann, Y.-L. Mathis, B. Gasharova, A.D. Wieck, M. Havenith, *J. Appl. Phys.* **110** (2011) 024307–024313. Non-invasive nano-imaging of ion implanted and activated copper in silicon
- G. Niehues, M. Heyden, D.A. Schmidt, M. Havenith, *Faraday Discussion* **150**(1) (2011) 193–207. Exploring hydrophobicity by THz absorption spectroscopy of solvated amino acids
- M. Krüger, S. Funkner, E. Bründermann, M. Havenith, *Journal of Infrared Millimeter and Terahertz Waves*, **32**(5) (2011) 699–715. Uncertainty and ambiguity in Terahertz parameter extraction and data analysis
- M. Grossmann, B. Born, M. Heyden, D. Tworowski, G.B. Fields, I. Sagi, M. Havenith, *Nature Structural & Molecular Biology*, **18**(10) (2011) 1102–1108. Correlated structural kinetics and retarded solvent dynamics at the metalloprotease active site

This article has been highlighted by: P. Ball, *News & Views in Nature* **478** (2011) 467–468. More than a bystander

- T. Poerschke, D. Habig, G. Schwaab, M. Havenith, *Z. Phys. Chem.* **225** (2011) 1447–1456. High resolution IR spectroscopy of the C-H stretch bands of benzene monomer and dimer in helium nanodroplets
- F. Ballout, H. Krassen, I. Kopf, K. Ataka, E. Bründermann, J. Heberle, B. Gasharova, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** (2011) 21432–21436. Scanning near field IR microscopy of proteins in lipid bilayers
- T.Q. Luong, P. Verma, R. Mitra, M. Havenith, *J. Phys. Chem. A* **115** (2011) 14462–14469. Onset of hydrogen bonded collective network of water in 1,4-dioxane
- S. Ebbinghaus, M. Gruebele, *J. Phys. Chem. Lett.* **2** (2011) 314–319. Protein Folding Landscapes in the Living Cell

- A. Dhar, K. Girdhar, D. Singh, H. Gelman, S. Ebbinghaus, M. Gruebele. *Biophys. J.* **101** (2011) 1-10. Protein Stability and Folding Kinetics in the Nucleus and Endoplasmic Reticulum of Eucaryotic Cells

Analytische Chemie

- A. Dobrzeniecka, A. Zeradjanin, J. Masa, J. Stroka, M. Goral, W. Schuhmann, P. J. Kulesza, *ECS Trans.* **35** (2011) 33. Scanning electrochemical microscopy for investigation of multi-component bioelectrocatalytic films
- S. Borgmann, S. Neugebauer, A. Schulte, W. Schuhmann, in “Advances in Electrochemical Science and Engineering. Vol. 13. Bioelectrochemistry, Applications and Recent Developments” (R. Alkire, M. D. Kolb, J. Lipkowski; eds.) Wiley-VCH. 2011, ISBN-10: 3-527-32885-8. Biosensors
- A. R. Zeradjanin, T. Schilling, S. Seisel, M. Bron, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **83** (2011) 7645–7650. Visualization of chlorine evolution at dimensionally stable anodes by means of scanning electrochemical microscopy
- M. Pähler, W. Schuhmann, M. Gratzl, *ChemPhysChem* **12** (2011) 2798–2805. Visualization of surface morphology and local concentration at a diffusional source using SECM combined with impedance spectroscopy
- C. Jin, T. C. Nagaiah, W. Xia, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *ChemSusChem* **4** (2011) 927-930. Polythiophene-assisted vapor phase synthesis of carbon nanotube supported rhodium sulfide electrocatalysts for the oxygen reduction reaction
- N. Hüsken, M. Gebala, F. La Mantia, W. Schuhmann, N. Metzler-Nolte, *Chem. Eur. J.* **17** (2011) 9678-9690. Mechanistic studies of Fc-PNA(•DNA) surface dynamics based on the kinetics of electron-transfer processes
- A. Badura, T. Kothe, W. Schuhmann, M. Rögner, *Energy Environ. Sci.* **4** (2011) 3263-3274. Wiring photosynthetic enzymes to electrodes.
- A. Maljusch, B. Schönberger, A. Lindner, M. Stratmann, M. Rohwerder, W. Schuhmann *Anal. Chem.* **83** (2011) 6114-6120 An integrated SKP-SECM system: development and first applications
- T. Beneyton, Y. Beyl, D. A. Guschin, A. D. Griffiths, V. Taly, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **23** (2011) 1781-1789. The thermophilic *CotA* laccase from *Bacillus subtilis*: Bioelectrocatalytic evaluation of O₂ reduction in the direct and mediated electron transfer regime.
- O. Smutok, G. Gayda, K. Dmytruk, H. Klepach, M. Nisnevitch, A. Sibirny, C. Puchalski, D. Broda, W. Schuhmann, M. Gonchar, V. Sibirny. In “*Biosensors for Health, Environment and Biosecurity / Book 1*”; InTech - Open Access Publisher. (2011) 411-446. Amperometric biosensors for lactate, alcohols and glycerol assays in clinical diagnostics
- S. Schwamborn, M. Etienne, W. Schuhmann *Electrochem. Commun.* **13** (2011) 759–762. Local electrocatalytic induction of sol-gel deposition at Pt nanoparticles

- Y. M. Temerk, M. M. Kamal, M. S. Ibrahim, H. S. M. Ibrahim, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **23** (2011) 1638-1644. Electrochemical behaviour of the anticancer dacarbazine-Cu²⁺ complex and its analytical applications
- A. Badura, D. Guschin, T. Kothe, M. J. Kopczak, W. Schuhmann, M. Rögner, *Energy Environ. Sci.* **4** (2011) 2435 - 2440. Photocurrent generation using Photosystem 1 integrated within crosslinked redox hydrogels. DOI: 10.1039/C1EE01126J
- K. Dmytruk, O. Smutok, O. Dmytruk, W. Schuhmann, A. Sibirny, *BMC Biotechnology* **11** (2011) 58. doi:10.1186/1472-6750-11-58. Construction of uricase-overproducing strains of *Hansenula polymorpha* and its application as biological recognition element in microbial urate biosensor.
- S. Schwamborn, L. Stoica, W. Schuhmann *ChemPhysChem* **12** (2011) 1741-1746. An electrochemical approach for the preparation of PtAg nanoparticles for oxygen reduction reaction in alkaline media. DOI: 10.1002/cphc.201100029
- M. Gebala, W. Schuhmann, F. La Mantia, *Electrochem. Commun.* **13** (2011) 689–693. A new AC-SECM mode. On the way to high-resolution local impedance measurements in SECM
- W. Xia, J. Masa, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *Electrochem. Commun.* **13** (2011) 593–596. Highly active metal-free nitrogen-containing carbon catalysts synthesized by thermal treatment of polypyridine-carbon black mixtures for the oxygen reduction in alkaline electrolyte
- B. B. Berkes, A. Maljusch, W. Schuhmann, A. S. Bondarenko, *J. Phys. Chem. C* **115** (2011) 9122-9130. Simultaneous acquisition of impedance and gravimetric data in a cyclic potential scan for the characterization of non-stationary electrode /electrolyte interfaces
- Y. Beyl, D. A. Guschin, S. Shleev, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **13** (2011) 474-476. A chloride resistant high potential oxygen reducing biocathode based on a fungal laccase incorporated into an optimized Os-complex modified redox hydrogel
- V. S. Vidyarthia, M. Hofmann, A. Savan, K. Sliozberg, D. König, R. Beranek, W. Schuhmann, A. Ludwig, *Int. J. Hydrogen Energ.* **36** (2011) 4724-4731. Enhanced photoelectrochemical properties of WO₃ thin films fabricated by reactive magnetron sputtering
- S. Schwamborn, M. Bron, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **23** (2011) 588-594. Probing the Pt surface for oxygen reduction by insertion of Ag
- D. Schäfer, C. Mardare, A. Savan, M. D. Sanchez, B. Mei, W. Xia, M. Muhler, A. Ludwig, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **83** (2011) 1916-1923. High-throughput characterization of Pt supported on thin film oxide material libraries with respect to electrocatalytic oxygen reduction
- S. Intarakamhang, C. Leson, W. Schuhmann, A. Schulte, *Anal. Chim. Acta* **67** (2011) 1-6. A novel automated electrochemical ascorbic acid assay in the 24-well microtiter plate format

- H. Shkil, A. Schulte, D.A. Guschin, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **12** (2011) 806-813. Electron-transfer between genetically modified *Hansenula polymorpha* yeast cells and electrode surfaces via Os-complex modified redox polymers
- M. Gebala, G. Hartwich, W. Schuhmann, *Faraday Disc.* **149** (2011) 11–22. Amplified detection of DNA hybridization using post-labelling with a biotin-modified intercalator
- M. Pähler, J. J. Santana, W. Schuhmann, R. M. Souto, *Chem. Eur. J.* **17** (2011) 905-911. Application of AC-SECM in corrosion science - local visualisation of inhibitor films on active metals for corrosion protection
- K. Piekielska, M. Gębala, S. Gwiazda, S. Müller, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **23** (2011) 37-42. Impedimetric detection of hairpin ribozyme activity
- Y. Geldmacher, R. Rubbiani, P. Wefelmeier, A. Prokop, I. Ott, W. S. Sheldrick, *J. Organomet. Chem.* **696** (2011) 1023-1031. Synthesis and DNA-binding properties of apoptosis-inducing cytotoxic half-sandwich rhodium(III) complexes with methyl-substituted polypyridyl ligands.
- R. Bieda, I. Kitanovic, H. Alborzinia, A. Meyer, I. Ott, S. Wölfl, W. S. Sheldrick, *Biometals* **24** (2011) 645-661. Antileukemic activity and cellular effects of rhodium(III) crown thiaether complexes.
- Y. Geldmacher, I. Kitanovic, H. Alborzina, K. Bergerhoff, R. Rubbiani, P. Wefelmeier, A. Prokop, R. Gust, I. Ott, S. Wölfl, W. S. Sheldrick, *ChemMedChem* **6** (2011) 429-439. Cellular selectivity and biological impact of cytotoxic rhodium(III) and iridium(III) complexes containing methyl-substituted phenanthroline ligands.
- S. Naskar, S. Naskar, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, S. K. Chattopadhyay, *Polyhedron* **30** (2011) 529-534. Synthesis, X-ray crystal structures, spectroscopic and cyclic voltammetric study of Cu(II) Schiff base complexes of pyridoxal.
- M. Scholz, G. N. Kaluderović, H. Kommera, R. Paschke, J. Will, W. S. Sheldrick, E. Hey-Hawkins, *Eur. J. Med. Chem.* **46** (2011) 1131-1139. Carboranes as pharmacophores: similarities and differences between aspirin and asborin.
- N. Kaloyanov, R. Alexandrova, D. W. Wesselinova, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, G. D. Dimitrov, *Eur. J. Med. Chem.* **46** (2011) 1992-1996. Self-assembly of novel molecular complexes of 1,10-phenanthroline and 5-amino-1,10-phenanthroline and evaluation of their in vitro antitumour activity.
- F. Hackenberg, L. Oehninger, H. Alborzinia, S. Can, I. Kitanovic, Y. Geldmacher, M. Kokoschka, S. Wölfl, I. Ott, W. S. Sheldrick, *J. Inorg. Biochem.* **105** (2011) 991-999. Highly cytotoxic substitutionally inert rhodium(III) tris(chelate) complexes: DNA binding modes and biological impact on human cancer cells.
- M. Stefanopoulou, M. Kokoschka, W. S. Sheldrick, D.A. Wolters, *Proteomics* **11** (2011) 4174-4188. Cell response of *Escherichia coli* to cisplatin-induced stress.
- R. Rubbiani, S. Can, I. Kitanovic, H. Alborzinia, M. Stefanopoulou, M. Kokoschka, S. Mönchgesang, W. S. Sheldrick, S. Wölfl, I. Ott, *J. Med. Chem.* **54** (2011) 8646-8657. Comparative in vitro evaluation of N-heterocyclic carbene gold(I) complexes of the benzimidazolylidene type.

- L.B. Hu, F. La Mantia, H. Wu, X. Xie, J.R. McDonough, Y. Cui, *Advanced Energy Materials* **1** (2011) 1012. Lithium-Ion Textile Batteries with Large Areal Mass Loading
- H.D. Deshazer, F. La Mantia, C.D. Wessells, R.A. Huggins, Y. Cui, *J. Electrochem. Soc.* **158** (2011) A1079. Facile synthesis of nanoscale metal oxide particles of lithium-ion battery cathode materials using a porous polymer precursor method
- R. Ruffo, F. La Mantia, C.D. Wessells, R.A. Huggins, Y. Cui, *Solid State Ionics* **192** (2011) 289. Electrochemical characterization of LiCoO₂ as rechargeable electrode in aqueous LiNO₃ electrolyte
- F. La Mantia, M. Pasta, H.D. Deshazer, B.E. Logan, Y. Cui, *Nano Lett.* **11** (2011) 1810. Batteries for Efficient Energy Extraction from a Salinity Difference
- C.D. Wessells, F. La Mantia, H.D. Deshazer, R.A. Huggins, Y. Cui, *J. Electrochem. Soc.* **158** (2011) A352. Synthesis and electrochemical performance of a lithium titanium phosphate anode for aqueous lithium ion batteries
- M. Pasta, F. La Mantia, R. Ruffo, F. Peri, C. Della Pina, C.M. Mari, *J. Power Sourc.* **196** (2011) 1273. Optimizing operating conditions and electrochemical characterization of glucose-gluconate alkaline fuel cells
- A.S. Bondarenko, I.E.L. Stephens, H.A. Hansen, F.J. Prez-Alonso, V. Tripkovic, T.P. Johansson, J. Rossmeisl, J.K. Nørskov, I. Chorkendorff, *Langmuir* **27** (2011) 2058. The Pt(111)/electrolyte interface under oxygen reduction reaction conditions: an electrochemical impedance spectroscopy study
- I.E.L. Stephens, A.S. Bondarenko, F.J. Perez-Alonso, F. Calle-Vallejo, L. Bech, T.P. Johansson, A.K. Jepsen, R. Frydendal, B.P. Knudsen, J. Rossmeisl, I. Chorkendorff, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011) 5485. Tuning the activity of Pt(111) for oxygen electroreduction by subsurface alloying

Theoretische Chemie

- M. Böckmann, D. Marx, C. Peter, L. Delle Site, K. Kremer, N. L. Doltsinis, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** (2011) 7604-7621. Multiscale modelling of mesoscopic phenomena triggered by quantum events: light-driven azo-materials and beyond (Perspective Article)
- L. Walewski, H. Forbert, and D. Marx, *J. Phys. Chem. Lett.* **2** (2011) 3069-3074. Quantum Induced Bond Centering in Microsolvated HCl: Solvent Separated versus Contact Ion Pairs
- A. D. Boese, H. Forbert, M. Masia, A. Tekin, D. Marx, G. Jansen, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** (2011) 14550-14564. Constructing simple yet accurate potentials for describing the solvation of HCl/water clusters in bulk helium and nanodroplets
- A. Witt, S. D. Ivanov, G. Mathias, D. Marx, *J. Phys. Chem. Lett.* **2** (2011) 1377-1381. Quantum Molecular Dynamics Calculations of Ultrafast Timescales and Infrared Spectra of Protonated Methane: Quantifying Isotope-Specific Lifetimes
- P. Dopieralski, J. Ribas-Arino, D. Marx, *Angew. Chem. Int. Ed.* **50** (2011) 7105-7108. Force-Transformed Free-Energy Surfaces and Trajectory-Shooting Simulations Reveal the Mechano-Stereochemistry of Cyclopropane Ring-Opening Reactions

- M. Farnesi Camellone, P. M. Kowalski, D. Marx, *Phys. Rev. B* **84** (2011) 035413-1-18. Ideal, defective, and gold-promoted rutile TiO₂(110) surfaces interacting with CO, H₂, and H₂O: Structures, energies, thermodynamics, and dynamics from PBE+U
- M. Baer, D. Marx, G. Mathias, *ChemPhysChem* **12** (2011) 1906-1915. Assigning Pre-dissociation Infrared Spectra of Microsolvated Hydronium Cations H₃O⁺•(H₂)_n (n=0, 1, 2, 3) by Ab Initio Molecular Dynamics
- R. Pollet, N. N. Nair, D. Marx, *Inorg. Chem.* **50** (2011) 4791-4797. Water Exchange of a ProHance MRI Contrast Agent: Isomer-Dependent Free-Energy Landscapes and Mechanisms
- P. Dopieralski, P. Anjukandi, M. Rückert, M. Shiga, J. Ribas-Arino, D. Marx, *J. Mater. Chem.* **21** (2011) 8309-8316. On the role of polymer chains in transducing external mechanical forces to benzocyclobutene mechanophores
- E. Schreiner, N. N. Nair, C. Wittekindt, D. Marx, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011) 8216-8226. Peptide Synthesis in Aqueous Environments: The Role of Extreme Conditions and Pyrite Mineral Surfaces on Formation and Hydrolysis of Peptides
- H. Forbert, M. Masia, A. Kaczmarek-Kedziera, N. N. Nair, D. Marx, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011) 4062-4072. Aggregation-Induced Chemical Reactions: Acid Dissociation in Growing Water Clusters
- J. Kiss, J. Frenzel, N. N. Nair, B. Meyer, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **134** (2011) 064710-1-14. Methanol synthesis on ZnO(000-1). III. Free energy landscapes, reaction pathways, and mechanistic insights
- J. Sun, D. D. Klug, C. J. Pickard, R. J. Needs, *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 145502-1-145502-4. Controlling the Bonding and Band Gaps of Solid Carbon Monoxide with Pressure
- J. Kiss, D. Langenberg, D. Silber, F. Traeger, L. Jin, H. Qiu, Y. Wang, B. Meyer, C. Wöll, *J. Phys. Chem. A* **115** (2011) 7180-7188. Combined Theoretical and Experimental Study on the Adsorption of Methanol on the ZnO(1010) Surface
- J. Behler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** (2011) 17930-17955. Neural Network Potential-Energy Surfaces in Chemistry: A Tool for Large-Scale Simulations
- R.Z. Khaliullin, H. Eshet, T.D. Kühne, J. Behler, M. Parrinello, *Nature Materials* **10** (2011) 693-697. Nucleation mechanism for the direct graphite-to-diamond phase transition
- N. Artrith, T. Morawietz, J. Behler, *Phys. Rev. B* **83** (2011) 153101. High-Dimensional Neural Network Potentials for Multicomponent Systems: Applications to Zinc Oxide
- J. Behler, *J. Chem. Phys.* **134** (2011) 153101. Atom-Centered Symmetry Functions for Constructing High-Dimensional Neural Network Potentials
- N. O. C. Winter, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **134** (2011) 1841101. Scaled opposite-spin CC2 for ground and excited states with fourth order scaling computational costs.
- D. P. Tew, B. Helmich, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **135** (2011) 074107. Local explicitly correlated second-order Møller-Plesset perturbation theory with pair natural orbitals.

- S. Höfener, C. Hättig, W. Klopper, *Z. Phys. Chem.- Int. J. Res. Phys. Chem. & Chem. Phys.* **224** (2010) 695-708. Analytic Calculation of First-order Molecular Properties at the Explicitly-correlated Second-order Møller-Plesset Level.
- R. A. Bachorz, F. Bischoff, A. Glöß, C. Hättig, S. Höfener, W. Klopper, D. P. Tew, *J. Comput. Chem.* **32** (2011) 2492-2513. The MP2-F12 Method in the Turbomole Program Package.
- B. Helmich, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **135** (2011) 214106. Local pair natural orbitals for excited states.
- A. J. A. Aquino, D. Nachtigallova, P. Hobza, D. G. Truhlar, C. Hättig, H. Lischka, *J. Comput. Chem.* **32** (2011) 1217-1227. The charge-transfer states in a stacked nucleobase dimer complex: A benchmark study.
- W. Kutzelnigg, *Chemical Physics* **395** (2012) 16 [published online in 2011]. Solved and Unsolved Problems in Relativistic Quantum Chemistry.
- V. Staemmler, *J. Phys. Chem. A*, **115** (2011) 7153. Method of Local Increments for the Calculation of Adsorption Energies of Atoms and Small Molecules on Solid Surfaces. 2. CO/MgO(001).
- Y. K. Gao, F. Traeger, K. Kotsis, V. Staemmler, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13** (2011) 10709. A theoretical study of the XP and NEXAFS spectra of alanine: gas phase molecule, crystal, and adsorbate at the ZnO(10-10) surface.
- I. Piras, R. Jennerjahn, R. Jackstell, A. Spannenberg, R. Franke, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **50** (2011) 280-284. A general and efficient iridium-catalyzed hydroformylation of olefins
- A. Christiansen, D. Selent, A. Spannenberg, M. Köckerling, H. Reinke, W. Baumann, H. Jiao, R. Franke, A. Börner, *Chem. Eur. J.* **17** (2011) 2120-2129. Decomposition of P-Ligands During Rh-Catalysed Hydroformylation. Part IV. Heteroatom-Substituted Secondary Phosphine Oxides (HASPOs) as Decomposition Products and Preligands in Rhodium-Catalysed Hydroformylation
- R. Franke, M. Rudek, G. Baumgarten, *PharmaChem*, **10** (2011) 10-12. Nanofiltration developed to application readiness
- M. Jakuttis, A. Schönweiz, S. Werner, R. Franke, K.-D. Wiese, M. Haumann, P. Wasserscheid, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **50** (2011) 4492-4495. Rhodium-Phosphite SILP Catalysis for the Highly Selective Hydroformylation of Mixed C4 Feedstocks
- G. Walther, J. Deutsch, A. Martin, F.-E. Baumann, D. Fridag, R. Franke, A. Köckritz, *ChemSusChem*, **4** (2011) 1052-1054. α,ω -Functionalized C19 Monomers
- I. S. Mikhel, N. V. Dubrovina, I. A. Shuklov, W. Baumann, D. Selent, H. Jiao, A. Christiansen, R. Franke, A. Börner, *J. Organometal. Chem.*, **696** (2011) 3050-3057. Synthesis, complexation behavior and application of a new diphosphite ligand in rhodium-catalyzed hydroformylation
- D. Selent, R. Franke, C. Kubis, A. Spannenberg, W. Baumann, B. Kreidler, A. Börner, *Organometallics*, **30** (2011) 4509-4514. A New Diphosphite Promoting Highly Regioselective Rhodium-Catalyzed Hydroformylation

- M. Haumann, M. Jakuttis, R. Franke, A. Schoenweiz, P. Wasserscheid, *ChemCatChem*, **3** (2011) 1822-1827. Continuous Gas-Phase Hydroformylation of a Highly Diluted Technical C4 Feed using Supported Ionic Liquid Phase Catalysts
- R. Franke, B. Hannebauer, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13** (2011) 21344-21350. On the influence of basis set and quantum chemical method on the prediction accuracy of COSMO-RS for activity coefficients at infinite dilution
- W. R. C. Beyer, K. Woithe, B. Lueke, M. Schindler, H. Antonicek, J. Scherkenbeck, *Tetrahedron*, **67** (2011) 3062-3070. Asymmetric total synthesis of the indole alkaloid cyclopiazonic acid and first structure-activity data
- Sh. Yao, D. Gallenkamp, K. Woithe, B. Lücke, M. Schindler, J. Scherkenbeck, *Bioorg. Med. Chem.*, **19** (2011) 4669-78. Synthesis and SERCA Activities of Structurally Simplified Cyclopiazonic Acid Analogues
- P. Jeschke, R. Nauen, M. Schindler, A. Elbert, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, **59** (2011) 2897-2908. Overview of the Status and Global Strategy for Neonicotinoids.

Technische Chemie

- M.J. Becker, W. Xia, J.-P. Tessonnier, R. Blume, L. Yao, R. Schlögl, M. Muhler, *Carbon* **49** (2011) 5253–5264. Optimizing the synthesis of cobalt-based catalysts for the selective growth of multiwalled carbon nanotubes under industrially relevant conditions
- M. Behrens, D. Brennecke, F. Girgsdies, S. Kißner, A. Trunschke, N. Nasrudin, S. Zakaria, N.F. Idris, S.B.A. Hamid, B. Kniep, R. Fischer, W. Busser, M. Muhler, R. Schlögl, *Appl. Catal., A* **392** (2011) 93–102. Understanding the Complexity of a Catalyst Synthesis: Co-Precipitation of mixed Cu, Zn, Al Hydroxycarbonate Precursors for Cu/ZnO/Al₂O₃ Catalysts Investigated by Titration Experiments
- M. Behrens, S. Kißner, F. Girgsdies, I. Kasatkin, F. Hermerschmidt, K. Mette, H. Ruland, M. Muhler, R. Schlögl, *Chem. Commun.* **47** (2011) 1701–1703. Knowledge-Based Development of a Nitrate-Free Synthesis Route for Cu/ZnO Methanol Synthesis Catalysts via Formate Precursors
- T. Franzke, F. Rosowski, M. Muhler, *Chemie Ingenieur Technik* **83** (2011) 1705-1710. Redox-Zyklen zur Charakterisierung von Modellkatalysatoren für die selektive Propen-oxidation
- B. Graf, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** (2011) 3701–3710. The Influence of the Potassium Promoter on the Kinetics and Thermodynamics of CO Adsorption on a Bulk Iron Catalyst Applied in Fischer-Tropsch Synthesis: A Quantitative Adsorption Calorimetry, Temperature-Programmed Desorption, and Surface Hydrogenation Study
- C. Jin, T.C. Nagaiah, W. Xia, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *ChemSusChem* **4** (2011) 927–930. Polythiophene-Assisted Vapor Phase Synthesis of Carbon Nanotube-Supported Rhodium Sulfide as Oxygen Reduction Catalyst for HCl Electrolysis
- S. Kaluza, M. Behrens, N. Schiefenhövel, B. Kniep, R. Fischer, R. Schlögl, M. Muhler, *ChemCatChem* **3** (2011) 189–199. A Novel Synthesis Route for Cu/ZnO/Al₂O₃

Catalysts used in Methanol Synthesis: Combining Continuous Consecutive Precipitation with Continuous Aging of the Precipitate

- L. Katta, G. Thrimurthulu, B.M. Reddy, M. Muhler, W. Grünert, *Catal. Sci. Technol.* **1** (2011) 1645–1652. Structural characteristics and catalytic performance of alumina-supported nanosized ceria-lanthana solid solutions
- Z. Liu, A. Rittermeier, M. Becker, K. Kähler, E. Löffler, M. Muhler, *Langmuir* **27** (2011) 4728–4733. High-Pressure CO Adsorption on Cu-Based Catalysts: Zn-Induced Formation of Strongly Bound CO Monitored by ATR-IR Spectroscopy
- B. Mei, M.D. Sanchez, T. Reinecke, S. Kaluza, W. Xia, M. Muhler, *J. Mater. Chem.* **21** (2011) 11781–11790. The Synthesis of Nb-doped TiO₂ Nanoparticles by Spray Drying: An Efficient and Scalable Method
- H. Noei, C. Wöll, M. Muhler, Y. Wang, *J. Phys. Chem. C* **115** (2011) 908–914. Activation of Carbon Dioxide on ZnO Nanoparticles Studied by Vibrational Spectroscopy
- H. Noei, C. Wöll, M. Muhler, Y. Wang, *Appl. Catal., A* **391** (2011) 31–35. The interaction of carbon monoxide with clean and surface-modified zinc oxide nanoparticles: A UHV-FTIRS study
- V.A. Sadykov, N.N. Sazonova, A.S. Bobin, V.S. Muzykantov, E.L. Gubanova, G.M. Alikina, A.I. Lukashevich, V.A. Rogov, E.N. Ermakova, E.M. Sadovskaya, N.V. Mezentsseva, E.G. Zevak, S.A. Veniaminov, M. Muhler, C. Mirodatos, Y. Schuurman, A.C. van Veen, *Catalysis Today* **169** (2011) 125–137. Partial Oxidation of Methane on Pt-Supported Lanthanide Doped Ceria-Zirconia Oxides: Effect of the Surface/Lattice Oxygen Mobility on Catalytic Performance
- D. Schäfer, C. Mardare, A. Savan, M.D. Sanchez, B. Mei, W. Xia, M. Muhler, A. Ludwig, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **83** (2011) 1916–1923. High-Throughput Characterization of Pt Supported on Thin Film Oxide Material Libraries Applied in the Oxygen Reduction Reaction
- G. Shi, T. Franzke, W. Xia, M.D. Sanchez, M. Muhler, *Chem. Vap. Deposition* **17** (2011) 162–169. Highly Dispersed MoO₃/Al₂O₃ Shell-Core Composites Synthesized by CVD of Mo(CO)₆ under Atmospheric Pressure
- W. Xia, X.L. Yin, S. Kundu, M. Sánchez, A. Birkner, C. Wöll, M. Muhler, *Carbon* **49** (2011) 299–305. Visualization and Functions of Surface Defects on Carbon Nanotubes Created by Catalytic Etching
- W. Xia, J. Masa, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *Electrochem. Commun.* **13** (2011) 593–596. Highly Active Metal-Free Nitrogen-Containing Carbon Catalysts for Oxygen Reduction Synthesized by Thermal Treatment of Polypyridine-Carbon Black Mixtures
- M. Xu, Y. Gao, E.M. Moreno, M. Kunst, M. Muhler, Y. Wang, H. Idriss, C. Wöll, *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 138302. Photocatalytic Activity of Bulk TiO₂ Anatase and Rutile Single Crystals Using Infrared Absorption Spectroscopy
- O. Petrova, C. Kulp, M. W. E. van den Berg, K. V. Klementiev, B. Otto, H. Otto, M. Lopez, M. Bron, W. Grünert, *Rev. Sci. Instr.* **82** (2011) 044101-1 - 7. A Spectroscopic

PEM Fuel Cell Test Setup allowing Fluorescence XAS Measurements during State-of-the-art Cell Tests.

- M. W. E. van den Berg, A. De Toni, M. Bandyopadhyay, H. Gies, W. Grünert, *Appl. Catal. A* **391** (2011) 268-280. CO oxidation with Au/TiO₂ aggregates encapsulated in the mesopores of MCM-48: Model studies on activation, deactivation and metal-support interaction.
- De Toni, H. Gies, W. Grünert, *Catal. Lett.* **141** (2011) 1282-1287. The impact of water on CO oxidation with Au/TiO₂ catalysts – poison or promotor? A Study with an Au-TiO₂/MCM-48 model catalyst
- V. Isaeva, V. Chernyshev, E. Afonina, O. Tkachenko, K. Klementiev, V. Nissenbaum, W. Grünert, L. Kustov, *Inorg. Chim. Acta* **376** (2011) 367-372. Novel metal-organic 1-D coordination polymer based on pyrazine-2,5-dicarb-oxylate ligands: synthesis and structure investigation
- L. Katta, G. Thrimurthulu, B. M. Reddy, M. Muhler, W. Grünert, *Catal. Sci. Techn.* **1** (2011) 1645-1652. Structural Characteristics and Catalytic Performance of Alumina-supported Nanosized Ceria-Lanthana Solid Solutions.
- W. Grünert, *ChemCatChem* **3** (2011) 1955. “On Catalysis“, W. Reschetilowski, W. Höhle (Eds.), VWB Verlag für Wissenschaft und Bildung Berlin 2010 (Rezension)
- K. Wessels, T. Oekermann, M. Wark, *J. Adv. Oxid. Technol.* **14** (2011), 158-164. Low Temperature Preparation of Porous Crystalline TiO₂ Films Using a Combination of Electrochemical and Electrophoretal Deposition
- Y. Selk, M. Minnermann, T. Oekermann, M. Wark, J. Caro, *J. Appl. Electrochem.* **41** (2011), 445-452. Solid-state dye-sensitized ZnO solar cells prepared by low-temperature methods
- O. Merka, V. Yarovy, D.W. Bahnemann, M. Wark, *J. Phys. Chem. C* **115** (2011), 8014-8023. pH-Control of the Photocatalytic Degradation Mechanism of Rhodamine B over Pb₃Nb₄O₁₃ “
- T. von Graberg, P. Hartmann, A. Rein, S. Gross, B. Seelandt, C. Röger, R. Zieba, A. Traut, M. Wark, J. Janek, B.M. Smarsly, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **12** (2011), 025005; Mesoporous tin-doped indium oxide thin films: effect of mesostructure on electrical conductivity
- M. Sharifi, R. Marschall, M. Wilhelm, D. Wallacher, M. Wark, *Langmuir* **27** (2011), 5516-5522; Detection of homogeneous distribution of functional groups in mesoporous silica by small angle neutron scattering and in-situ adsorption of nitrogen or water
- M. Sharifi, C. Köhler, P. Tölle, T. Frauenheim, M. Wark, *Small* **8** (2011), 1086-1097. Proton conductivity of SO₃H-functionalized benzene-PMO
- A.A. Ismail, D.W. Bahnemann, J. Rathousky, V. Yarovy, M. Wark, *J. Mater. Chem.* **21** (2011), 7802-7810. Multilayered ordered mesoporous platinum/titania composite films: does the photocatalytic activity benefit from the film thickness?
- A. Düvel, E. Romanova, M. Sharifi, D. Freude, M. Wark, P. Heitjans, M. Wilkening, *J. Phys. Chem. C* **115** (2011) 22770–22780. Mechanically Induced Phase Transformation

of γ -Al₂O₃ into α -Al₂O₃: Access to Structurally Disordered γ -Al₂O₃ with a Controllable Amount of Pentacoordinated Al Sites

- E. Ebner, M. Wark, A. Börger, *Chemie-Ingenieur-Technik* **83** (2011), 2051-2058. Passive Mischelemente zur Elektrolytkonvektion in Blei-Säure-Nassbatterien
- R. Marschall, M. Sharifi, M. Wark, *Chemie-Ingenieur-Technik* **83** (2011), 2177-2187. Protonenleitende Komposit-Membranen für zukunftsorientierte Anwendungen in Brennstoffzellen, Entsalzungsanlagen und in der Photokatalyse
- M H. Qiu, F. Gallino, C. Di Valentin, Y. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 066401. Shallow donor states induced by in-diffused Cu in ZnO: A combined HREELS and hybrid DFT study
- M. Xu, Y.K. Gao, E. M. Moreno, M. Kunst, M. Muhler, Y. Wang, H. Idriss, Ch. Wöll, *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 138302. Photocatalytic activity of bulk TiO₂ anatase and rutile single crystals using infrared absorption spectroscopy
- J D. Esken, H. Noei, Y. Wang, C. Wiktor, S. Turner, G. van Tendeloo, RA. Fischer, *J. Mater. Chem.* **21** (2011) 5907-5915. ZnO@ZIF-8: stabilization of quantum confined ZnO nanoparticles by a zinc methylimidazolate framework and their surface structural characterization probed by CO₂ adsorption
- J. Kiss, D. Langenberg, D. Silber, F. Traeger, L. Jin, H. Qiu, Y. Wang, B. Meyer, C. Wöll, *J. Phys. Chem. A*, **115** (2011) 7180-7188. Combined theoretical and experimental study on the adsorption of methanol on the ZnO(10-10) surface
- O. Kozachuk, K. Yusenko, H. Noei, Y. Wang, S. Walleck, T. Glaser, RA. Fischer, *Chem. Comm.* **47** (2011) 8509-8511. Solvothermal growth of a rithenium metal-organic framework featuring HKUST-1 structure type as thin films on oxide
- MY. Ma, A. Gross, D. Zacher, A. Pinto, H. Noei, Y. Wang, RA. Fischer, N. Metzler Nolte, *CrystEngComm*, **13**, (2011) 2828-2832. Use of confocal flurescence microscopy to compare different methods of modifying metal-organic framework (MOF) crystals with dyes
- M. Muller, S. Turner, OI. Lebedev, Y. Wang, G. van Tendeloo, R.A. Fischer, *Eur. J. Inorg. Chem.* **12** (2011) 1876-1887. Au@MOF-5 and Au/MO(x)@MOF-5 (M=Zn, Ti; x=1,2): Preparation and Microstructural Characterization
- J. Strunk, W.C. Vining, A.T. Bell, *J. Phys. Chem. C* **115** (2011) 4114-4126. Synthesis of different CeO₂ structures on mesoporous silica and characterization of their reduction properties
- W.C. Vining, J. Strunk, A.T. Bell, *J. Catal.* **281** (2011) 222-230. Investigation of the structure and activity of VO_x/ZrO₂/SiO₂ catalysts for methanol oxidation to formaldehyde
- M. Błedowski, L. Wang, A. Ramakrishnan, O.V. Khavryuchenko, V.D. Khavryuchenko, P. Carlo Ricci, J. Strunk, T. Cremer, C. Kolbeck, R. Beranek, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** (2011) 21511-21519. Visible-light photocurrent response of TiO₂-polyheptazine hybrids: evidence of interfacial charge-transfer absorption

- W. Xia, B. Mei, M.D. Sanchez, J. Strunk, M. Muhler, *J. Nanosci. Nanotechnol.* **11** (2011) 8152-8157. TiO₂ coating of high surface area silica by chemical vapor deposition of TiCl₄ in a fluidized-bed reactor.

Biochemie 1

- T. Huelsken, S. Schreiber, M. Hollmann, *Mitteilungen der Deutschen Malakozoologischen Gesellschaft* **85** (2011) 17-26. COI amplification success from mucus-rich marine gastropods (Gastropoda: Naticidae) depends on DNA extraction method and preserving agent
- M.I.K. Hamad, Z.-L. Ma-Högemeier, C. Riedel, C. Conrads, T. Veitinger, T. Habijan, J.-N. Schulz, M. Wirth, M. Krause, M. Hollmann, P. Wahle, *Development* **138** (2011) 4001-4013. Cell class-specific regulation of neocortical dendrite and spine growth by AMPA receptor splice and editing variants
- T. Huelsken, H. Wägele, B. Peters, A. Mather, M. Hollmann, *Molluscan Research* **31**(3) (2011) 141-151. Molecular analysis of adults and egg masses reveals two independent lineages within the infaunal gastropod *Naticarius onca* (Röding, 1798) (Caenogastropoda: Naticidae)
- C. Carnarius, M. Kreir, M. Krick, C. Methfessel, V. Moehrle, O. Valerius, A. Brügge-mann, C. Steinem, N. Fertig, *Journal of Biological Chemistry* **287**, Epub 2011 Dec 3. Green fluorescent protein changes the conductance of connexin 43 (Cx43) hemichannels reconstituted in planar lipid bilayers
- J. Prickaerts, N.P. van Goethem, R. Chesworth, G. Shapiro, F.G. Boess, C. Methfessel, O.A. Reneerkens, D.G. Flood, D. Hilt, M. Gawryl, S. Bertrand, D. Bertrand, G. Koenig, *Neuropharmacology* **62**, Epub 2011 Nov 10. EVP-6124, a novel and selective $\alpha 7$ nicotinic acetylcholine receptor partial agonist, improves memory performance by potentiating the acetylcholine response of $\alpha 7$ nicotinic acetylcholine receptors
- H. Fröhlich, K.M. Boini, G. Seebohm, N. Strutz-Seebohm, O.N. Ureche, M. Föller, M. Eichenmüller, E. Shumilina, G. Pathare, A.K. Singh, U. Seidler, K.E. Pfeifer, F. Lang, *Pflügers Archiv: European Journal of Physiology* **461**(1) (2011) 45-52. Hypothyroidism of gene-targeted mice lacking KCNQ1
- I. Alesutan, C. Munoz, M. Sopjani, M. Dërmaku-Sopjani, D. Michael, S. Fraser, B.E. Kemp, G. Seebohm, M. Föller, F. Lang, *Biochemical and Biophysical Research Communications*, **408**(4) (2011) 505-510. Inhibition of Kir2.1 (KCNJ2) by the AMP-activated protein kinase
- N. Strutz-Seebohm, M. Pusch, S. Wolf, R. Stoll, D. Tapken, K. Gerwert, B. Attali, G. Seebohm, *Cellular Physiology and Biochemistry* **27**(5) (2011) 443-452. Structural basis of slow activation gating in the cardiac I Ks channel complex
- I. Alesutan, M. Föller, M. Sopjani, M. Dërmaku-Sopjani, C. Zelenak, H. Fröhlich, A. Velic, S. Fraser, B.E. Kemp, G. Seebohm, H. Völkl, F. Lang, *Molecular Membrane Biology* **28**(2) (2011) 79-89. Inhibition of the heterotetrameric K⁺ channel KCNQ1/KCNE1 by the AMP-activated protein kinase
- E. Wrobel, G. Seebohm, *Heart Rhythm* **8**(7) (2011) 1081-1082. Potential in targeting classical inward rectifier channels

- G. Seeböhm, N. Strutz-Seeböhm, O.N. Ursu, R. Preisig-Müller, M. Zuzarte, E.V. Hill, M.C. Kienitz, S. Bendahhou, M. Fauler, D. Tapken, N. Decher, A. Collins, K. Jurkat-Rott, K. Steinmeyer, F. Lehmann-Horn, J. Daut, J.M. Tavaré, L. Pott, W. Bloch, F. Lang, *FASEB Journal* **26**, Epub 2011 Oct 14. Altered stress stimulation of inward rectifier potassium channels in Andersen-Tawil syndrome
- C. Munoz, R.H. Tóvolli, M. Sopjani, I. Alesutan, R.S. Lam, G. Seeböhm, M. Föller, F. Lang, *Biochemical and Biophysical Research Communications* **417**, Epub 2011 Dec 7. Activation of voltage gated K⁺ channel Kv1.5 by β -catenin.
- S. Eilebrecht, C. Bécavin, H. Léger, B.J. Benecke, A. Benecke, *RNA Biol.* **8**(1) (2011) 143-157. HMGA1-dependent and independent 7SK RNA gene regulatory activity
- S. Eilebrecht, B.J. Benecke, A. Benecke, *RNA Biol.* **8**(6) (2011) 1084-1093. 7SK snRNA-mediated, gene-specific cooperativity of HMGA1 and P-TEFb

Biochemie 2

- M. Manns, O. Leske, S. Gottfried, Z. Bichler, P. Lafenetre, P. Wahle, R. Heumann, *Front. Neurosci.* **5** (2011) 18. Role of neuronal Ras activity in adult hippocampal neurogenesis and cognition
- P. Lafenetre, O. Leske, P. Wahle, R. Heumann, *Front. Neurosci.* **5** (2011) 51. The beneficial effects of physical activity on impaired adult neurogenesis and cognitive performance
- G. Gasser, S. Neumann, I. Ott, M. Seitz, R. Heumann, N. Metzler-Nolte, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **36** (2011) 5471-5478. Preparation and Biological Evaluation of Di-Hetero-Organometallic-Containing PNA Bioconjugates.
- M. Aktas, J. Gleichenhagen, R. Stoll, F. Narberhaus, *J. Bacteriology* **193** (2011) 3473-3481. S-adenosylmethionin-binding properties of a bacterial phospholipid N-methyl-transferase
- N. Strutz-Seeböhm, M. Pusch, S. Wolf, R. Stoll, D. Tapken, K. Gerwert, B. Attali, G. Seeböhm, *Cell. Physiol. Biochem.* **27** (2011) 443-452. Structural basis of slow activation gating in the cardiac I Ks channel complex
- X. Hou, N. Hagemann, S. Schoebel, W. Blankenfeldt, R.S. Goody, K. Erdmann, A. Itzen, *EMBO J.* **30** (2011) 1659-70. A structural basis for Lowe syndrome caused by mutations in the Rab-binding domain of OCRL1
- S. Thiele, M. Rauner, C. Goettsch, T.D. Rachner, P. Benad, S. Fuessel, K. Erdmann, C. Hamann, G.B. Baretton, M.P. Wirth, F. Jakob, L.C. Hofbauer, *J Cell Biochem.* **112** (2011) 1593-600. Expression profile of WNT molecules in prostate cancer and its regulation by aminobisphosphonates

Didaktik der Chemie

- K. Sommer, P. Pfeifer, J. Reiß, *Praktische Alltagschemie*. Aulis-Verlag, Köln 2011, ISBN-10: 978-3-7614-2793-X.
- K. Sommer, *Forscher Ferien Dokumentation*. Deutsche Telekom Stiftung (240 Seiten + CD), Bochum/Bonn 2011, ISBN-13: 978-3-9813300-1-4

- P. Pfeifer, S. Schaffer, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **23** (2011) 126, 2-9. Schülerexperimente im Unterricht.
- K. Sommer, *Unterricht Chemie* **23** (2011) 123, 22-29. Forscher Ferien – Eine naturwissenschaftliche Sommerschule für Grundschulkinder aus sozial benachteiligten Umgebungen.
- Schuhmann, A. Russek, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **23** (2011) 122, 18-21. Wie viel Wasser ist im Hamburger?
- R. Wieczorek, K. Sommer, *J. Chem. Ed.* **88** (2011) 4, 468-469. Demonstrating the Antioxidative Capacity of Substances with Lightsticks.
- K. Sommer, A. Russek, H. Kleinhorst, *Nachrichten aus der Chemie* **59** (2011) 10, 959-963. Eltern und Kinder: Gemeinsam ins Labor.

Promotionen

Mingyan Ma

Preparation and Characterization of Metal-Organic Frameworks for Biological Applications

Prof. Dr. N. Metzler-Nolte

21.12.2011

Martina Saes

Strukturelle und Funktionelle Aspekte des Herztroponin I-WT und -R20C

Prof. Dr. K. Jaquet

21.12.2011

Tarek Ahmet Al Ammar

Sonochemical Synthesis and Characterization of Metal Oxides Nanoparticles in Ionic Liquids

Prof. Dr. A.-V. Mudring

20.12.2011

Sebastian Henke

Metal-Organic Frameworks with Additional Flexible Substituents - Modulating Responsiveness, Gas Sorption Selectivity & Network Topologies

Prof. Dr. R.A. Fischer

20.12.2011 (mit Auszeichnung)

Y-Am Huynh

Synthese und Charakterisierung organischer Quintett- und Septett-Verbindungen bei kryogenen Temperaturen und Beiträge zur Synthese stabiler Dioxirane

Prof. Dr. W. Sander

19.12.2011

Xia Stammer

Oberflächenmodifizierung und -funktionalisierung von selbst-assemblierten Monolagen und metall-organischen Gerüstverbindungen und die spektroskopische Charakterisierung

Prof. Dr. Chr. Wöll

19.12.2011

Denise Zacher

Surface Chemistry of Metal-Organic Frameworks at the Liquid/Solid Interface MOFs on Surfaces - Surfaces of MOFs

Prof. Dr. R.A. Fischer

19.12.2011 (mit Auszeichnung)

Gerd Kock

Strukturelle Charakterisierung der PDZ3-Domäne der PTP-BL und des Komplexes aus PDZ3-Domäne und dem carboxy-terminalem Dodecapeptid der PRK2

Prof. Dr. R. Stoll

16.12.2011 (mit Auszeichnung)

Markus Halbherr

The Coordination Chemistry of Ga^+ at Gallium-rich Transition-Metal Complexes

Prof. Dr. R.A. Fischer

16.12.2011

Mahmoud Ashour Sliem

Preparation and Laser-Aided Characterization of Metal Oxide, Metal/Metal Oxide and Semiconductor Nanocolloids: Cu/ZnO-based Colloidal Catalyst for Methanol Synthesis

Prof. Dr. R.A. Fischer

16.12.2011

Maike Pähler

Entwicklung von globalen und lokalen Impedanz-basierten Analysetechniken für die Korrosionsforschung

Prof. Dr. W. Schuhmann

16.12.2011

Stefan Funkner

Experimentelle und theoretische Methoden zur Untersuchung von Terahertz-Spektren wässriger Lösungen. Die Interaktion von Wasser, monoatomaren Ionen und Harnstoff im Wasserstoffbrückennetzwerk

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

02.12.2011

Gudrun Niehues

Terahertz Spektroskopie und Simulation wässriger Lösungen

Hydrophobizität, Faltung, Ladungen und Phasenübergänge in Wasserstoffbrückennetz

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

02.12.2011

Tobias A. Plöger

Eine selbstreplizierende Peptidnukleinsäure

Prof. Dr. G. von Kiedrowski

02.12.2011(mit Auszeichnung)

Michael Jakob Bernhard Becker

Synthesis and Characterization of Cobalt-Manganese-Based Bulk Catalysts Applied for the Growth of Multi-Walled Carbon Nanotubes

Prof. Dr. M. Muhler

02.12.2011

Martina Reithmeier

Antireflecting Interlayers for Enhancing Transparency of Metal Layers for Internal Reflection Infrared Spectroscopy

Dr. A. Erbe (Prof. Dr. M. Stratmann)

02.12.2011

Mhd. Ali Nazif

Darstellung und DNA-Wechselwirkungen von potentiell zytotoxischen Organoiridium³-Bisinterkalatoren

Prof. Dr. W.S. Sheldrick

25.11.2011

Angela Orth

Die delta-Unterfamilie der Glutamatrezeptoren: Identifizierung interagierender Proteine und Charakterisierung von Rezeptorchimären und –mutanten

Prof. Dr. M. Hollmann

24.11.2011 (mit Auszeichnung)

Nina Hagemann

Funktionelle Charakterisierung der PDZ-Domänen Proteine FRMPD2 und PTP-BL in polarisierten Zellen

PD Dr. K.S. Erdmann

21.10.2011 (mit Auszeichnung)

Fouad Ballout

Vibrational Nanospectroscopic Imaging from Fundamentals to Applications

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

30.09.2011

Maria Stefanopoulou

Mass spectrometric analysis of the differential protein expression of living cell systems in the presence of metal-based antitumor compounds

Dr. D. Wolters

29.09.2011

Yvonne Beyl

Design von Elektronentransferpfaden für die biokatalytische Sauerstoffreduktion in Biobrennstoffzellen

Prof. Dr. W. Schuhmann

28.09.2011

Daniel Esken

Stabilization of cavity-size matching metal clusters and compound semiconductors inside metal-organic frameworks (MOFs)

Prof. Dr. R.A. Fischer

22.09.2011

Timo Bollermann

Intermetallic Chemistry: Molecular Compounds at the Borderline to Cluster Science

Prof. Dr. R.A. Fischer

05.09.2011 (mit Auszeichnung)

Sebastian Klemm

Microelectrochemical characterization of Zn, ZnO and Zn-Mg alloys with online dissolution monitoring

Prof. Dr. M. Stratmann

31.08.2011 (mit Auszeichnung)

Halyna Shkil

Genetically Modified Yeast Cells as a Basis for Biological Recognition and Sensing. Evaluation of Enzyme-Based and Cell-Based Electron Transfer Pathways

Prof. Dr. W. Schuhmann

29.08.2011

Jakob Valentin Weiß

Untersuchungen zur Freisetzung der Ektodomänen von Cadherin-17 und E-Cadherin und deren Nachweis im Serum von Patienten mit kolorektalem Karzinom

PD Dr. I. Schwarte-Waldhoff

11.08.2011

Katrin Faye Nickel

Untersuchung des Einflusses des Gerinnungsfaktors Thrombin auf die pulmonalarterielle Hypertonie

Prof. Dr. R. Heumann

29.07.2011

Malay Patra

Design, Synthesis and Biological Evaluation of Organometallic Antibacterial Agents

Prof. Dr. N. Metzler-Nolte

08.07.2011 (mit Auszeichnung)

Wiebke Hüggenberg

Anellated Calix[4]arenes

Prof. Dr. G. Dyker

08.07.2011

Holger Ruhland

Stationäre und instationäre kinetische Untersuchungen zur heterogen katalysierten Synthese von Methanol und höherer Alkohole

Prof. Dr. M. Muhler

24.06.2011

Stephan David Köster

Towards Mitochondria-Targeted Organometallic Peptide Bioconjugates: Synthesis, Biological Activity and Mode of Action

Prof. Dr. N. Metzler-Nolte

21.06.2011 (mit Auszeichnung)

Isabella Peruga

Mechanismen affektiver Störungen - Untersuchungen im Modell der experimentellen autoimmunen Enzephalomyelitis (EAE) und der naiven *ciliary neurotrophic factor* knock-out Maus

Prof. Dr. R. Gold

20.06.2011

Maike Müller

Synthesis and Characterization of Porous Coordination Polymers Loaded with Metal and Metal Oxide Nano Particles

Prof. Dr. R.A. Fischer

20.06.2011

Matthias Stiehm

Identifizierung einer Protease aus Stallstaubextrakten und ihr Einfluss auf die allergische Sensibilisierung und Atemwegsinflammation

Prof. Dr. med. A. Bufe

10.06.2011

Stefanie Schwamborn

Synthese und Charakterisierung von Trägermaterialien und Pt-basierten Katalysatoren für die elektrochemische Sauerstoffreduktion

Prof. Dr. W. Schuhmann

13.05.2011 (mit Auszeichnung)

Tobias Benjamin Thiede

From Molecules to Functional Materials: Systematic Evaluation of All Nitrogen Coordinated Metal Organic Complexes as Precursors for the MOCVD of Metal Nitride Thin Films

Prof. Dr. R.A. Fischer

13.05.2011

Mianmian Huang

Dielectric Properties of Ionic Liquids

Prof. Dr. H. Weingärtner

16.03.2011

Yathrib Ajaj

Dynamics and Thermodynamics of Protein Folding and Interactions in Water-Cosolvent Systems

Prof. Dr. H. Weingärtner

16.03.2011

Sebastian Neumann

Zelluläre Protektion bei Transfektion mit Calciumphosphat/DNA-Nanopartikeln und durch Regulation des *voltage-dependent anion channel-1* (VDAC-1)

Prof. Dr. R. Heumann

15.03.2011 (mit Auszeichnung)

Mikhail Meilikhov

Functional Materials based on Porous Coordination Polymers: From Host-Guest Chemistry to new Properties

Prof. Dr. R.A. Fischer

14.03.2011

Ilka Schmitt

Kupferatome in Wechselwirkung mit polaren Zinkoxidoberflächen: Eine quantenmechanische Studie

Prof. Dr. V. Staemmler

11.03.2011

Yvonne Geldmacher

Design und zelluläre Effekte von zytotoxischen Rhodium(III)- und Iridium(III)-Komplexen mit substituierten 1,10-Phenanthrolin-Liganden

Prof. Dr. W.S. Sheldrick

11.03.2011

Saeed Amirjalayer

Investigation of Structural and Dynamic Properties of Metal-Organic Frameworks

PD Dr. R. Schmid

08.03.2011 (mit Auszeichnung)

Johannes Zagermann

Tris(pyrazolyl)borate-containing Complexes of Ruthenium and Tungsten as Covalent Labels for Biomolecules

Prof. Dr. N. Metzler-Nolte

04.03.2011

Malte Henrik Kokoschka

Iridium(III)- und Rhodium(III)-haltige DNA (Bis-)Interkalatoren

Synthese und Analyse der DNA-Wechselwirkung durch experimentelle Methoden und Molecular Modeling

Prof. Dr. N. Metzler-Nolte

04.03.2011

Guido Uhlenbrock

Identifizierung und Charakterisierung von Histamintransportern im visuellen System von *Drosophila melanogaster*

Prof. Dr. B. Hovemann

03.03.2011

Olga Taran

Synthesis of information-carrying polymers of mixed sequences from double stranded short deoxynucleotides

Prof. Dr. G. von Kiedrowski

18.02.2011

Nils Hellwig

Imidazol-Lipide: Zur chemischen Implementierung eines Minimalen Chemotons als Modellsystem für Protozellen

Prof. Dr. G. von Kiedrowski

04.02.2011

Thomas Franzke

Kinetic Investigation of the Heterogeneously Catalysed Selective Oxidation of Propene to Acrolein on Molybdenum Based Mixed Oxides

Prof. Dr. M. Muhler

28.01.2011

Barbara Graf

The coupling of transient kinetic measurements with adsorption calorimetry for clarification of the structure-response relationship in Fischer-Tropsch catalysts

Prof. Dr. M. Muhler

28.01.2011 (mit Auszeichnung)

Sven Hippe

Einfluss von Stickstoffmonoxid induzierter Membranfluidität auf die Differenzierung neuraler Zellen

Prof. Dr. R. Heumann

24.01.2011

Adrian Josef Russek

KEMIE - Kinder Erleben Mit Ihren Eltern Chemie - Entwicklung und Evaluation von speziellen Experimentierangeboten mit dem Schwerpunkt naturwissenschaftliche Denk- und Arbeitsweisen

Prof. Dr. K. Sommer

21.01.2011

Julia Lorke

Untersuchungen zum Zusammenhang von Bild und Verständnis der Fachmethode Chromatographie

Prof. Dr. K. Sommer

14.01.2011 (mit Auszeichnung)