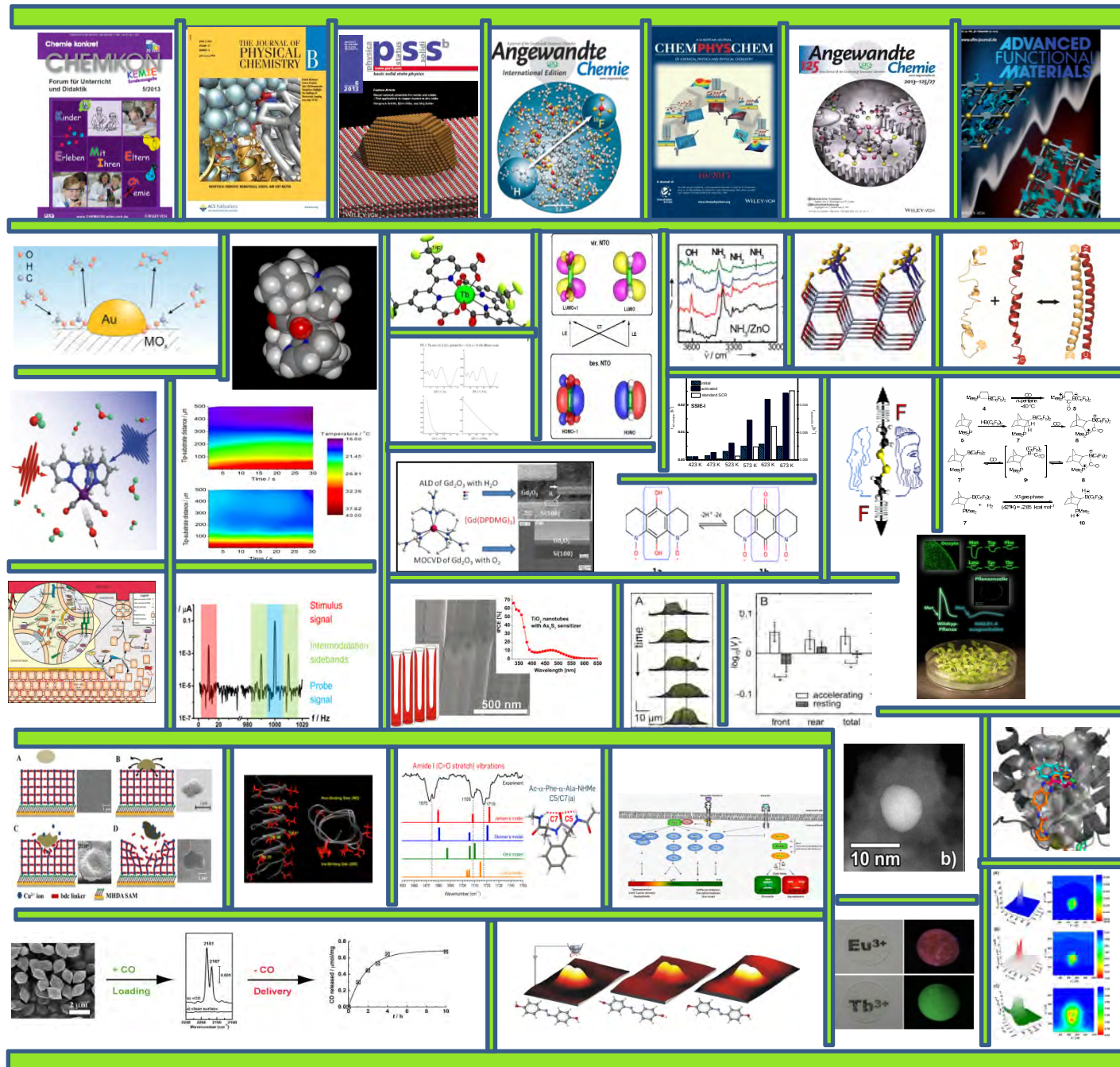


Ruhr-Universität Bochum

Fakultät für Chemie und Biochemie

Forschung 2013



Research 2013

Faculty of Chemistry

Ruhr-Universität Bochum

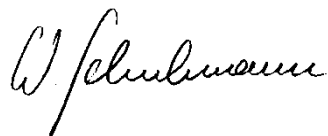
Es hat sich wieder viel getan an der Fakultät für Chemie und Biochemie der Ruhr-Universität Bochum. Weitere Informationen finden Sie auf den Webseiten der einzelnen Arbeitsgruppen oder über die Homepage der Fakultät (<http://www.chemie.rub.de/>) sowie bei den Pressemitteilungen zu besonderen Highlights (<http://www.chemie.rub.de/fak/newstermine/presse.html>).

Again many interesting things happened at the faculty of chemistry and biochemistry of the Ruhr-Universität Bochum. This yearly report is supposed to provide a flavor about the diversity of the research topics, some highlights of current research as well as the published papers of the year 2013 and the names and topics of all successfully accomplished PhD thesis at our faculty. For more information you are welcome to contact the research groups directly following the links, email addresses or telephone numbers provided with the research highlights. Or you just visit the website of our faculty (<http://www.chemie.rub.de/>) or look back to the press releases about highlights (<http://www.chemie.rub.de/fak/newstermine/presse.html>).

More information you may find also following the links below:

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

Bochum, August 2014



(Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann)

Beispiele aus der Forschung

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 1

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

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2

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

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 3

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

Lehrstuhl für Organische Chemie 1

Prof. Dr. Stefan Huber	11
------------------------------	----

Lehrstuhl für Organische Chemie 2

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

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1

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

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 2

Prof. Dr. Martina Havenith-Newen	15
Prof. Dr. Hermann Weingärtner	16
Prof. Dr. Patrick Nürnberger	17
Dr. Christian Müller	18

Lehrstuhl für Analytische Chemie

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

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Dominik Marx	25
PD Dr. Jörg Behler	26
Prof. Dr. Christof Hättig	27
Prof. Dr. Volker Staemmler	28
Prof. Dr. Robert Franke	29
Prof. Dr. Lars Schäfer	30
Prof. Dr. Werner Kutzelnigg	31

Lehrstuhl für Technische Chemie

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

Lehrstuhl für Biochemie 1

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

Lehrstuhl für Biochemie 2

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

Didaktik der Chemie

Prof. Dr. Katrin Sommer	40
-------------------------------	----

Transport and signalling mechanisms in polarized cells (TRANSPOL)	41
Photocat	42
BIOENERGY	43
ZEMOS	44
RESOLV	44

Veröffentlichungen

Anorganische Chemie 1	48
Anorganische Chemie 2	49
Anorganische Chemie 3	52
Organische Chemie 1	53
Organische Chemie 2	53
Physikalische Chemie 1	54
Physikalische Chemie 2	55
Analytische Chemie	56
Theoretische Chemie	61
Technische Chemie	65
Biochemie 1	68
Biochemie 2	68
Didaktik der Chemie	69

Promotionen 2013	71
-------------------------------	----

Nils Metzler-Nolte

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - [Bioanorganische Chemie](#);

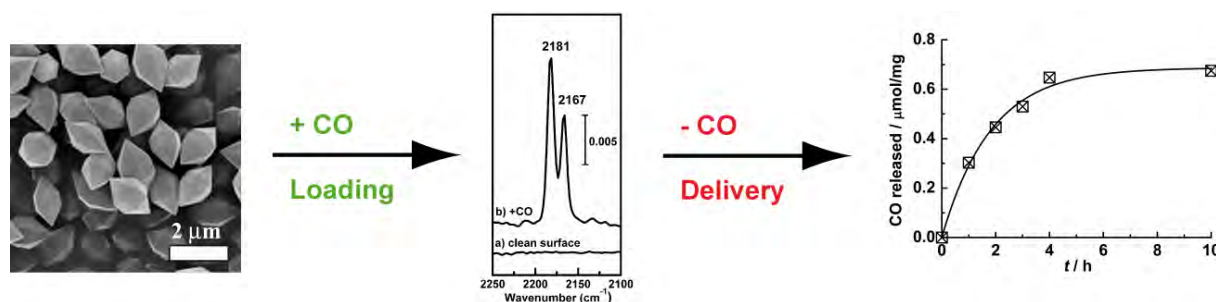
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

M. Ma, H. Noei, B. Mienert, J. Niesel, E. Bill, M. Muhler, R. A. Fischer, Y. Wang, U. Schatzschneider, N. Metzler-Nolte, *Chem. Eur. J.* **19** (2013) 6785 – 6790. Iron metal-organic frameworks MIL-88B and NH₂-MIL-88B for the loading and delivery of the gasotransmitter carbon monoxide

MIL-88B-Fe and NH₂-MIL-88B-Fe crystals were prepared by a novel rapid microwave-assisted solvothermal method. High purity, spindle-shaped MIL-88B-Fe crystals and needle-shaped NH₂-MIL-88B-Fe crystals in μm dimensions were produced with uniform size and excellent crystallinity. The reducibility of this synthesis method was also very good. Chemical capture of carbon monoxide in these as-prepared materials was studied by *in situ*-Ultrahigh Vacuum Fourier Transform Infrared (UHV-FTIR) and Mössbauer spectroscopy. CO binding occurs to unsaturated coordination sites (CUS). The CO release from the as-prepared materials was studied with the myoglobin assay in physiological buffer. The CO release is controlled by the degradation of the MIL materials under physiological conditions. The MIL-88B-Fe and NH₂-MIL-88B-Fe materials show good biocompatibility and have potential to be used in pharmacological and therapeutic applications as carriers and delivery vehicles for the gasotransmitter carbon monoxide.



Kristalle der porigen Koordinationspolymere MIL-88B-Fe und NH₂-MIL-88B-Fe wurden mittels einer optimierten Mikrowellen-gestützten Synthesemethode in sehr guter Reinheit hergestellt. Spindelförmige MIL-88B-Fe Kristalle (links in der Abbildung) und nadelförmiges NH₂-MIL-88B-Fe wurden jeweils in μm großen Kristalliten mit einheitlicher Größe und exzellenter Kristallinität erhalten. Die Reproduzierbarkeit unserer Methode war sehr gut. Die Aufnahme von Kohlenmonoxid in diese Materialien wurde mittels *in situ*-Hochvakuum-Fourier-Transformations-Infrarot-Spektroskopie (UHV-FTIR, mittleres Spektrum) und Mössbauer Spektroskopie untersucht. Das CO Molekül bindet an die ungesättigten Koordinationsstellen in diesen Koordinationspolymeren (unsaturated coordination sites, CUS). Die Abgabe von CO aus diesen Materialien wurde mittels des Myoglobin-Assays unter physiologischen Bedingungen quantifiziert. Die Freisetzung des CO (rechts in der Abbildung) geht einher mit der Zersetzung der MIL Materialien unter physiologischen Bedingungen. Beide Materialien, MIL-88B-Fe und NH₂-MIL-88B-Fe, zeigen eine gute Biokompatibilität und haben das Potential für pharmakologische und therapeutische Anwendungen als Carrier für den physiologisch relevanten Gasotransmitter Kohlenmonoxid.

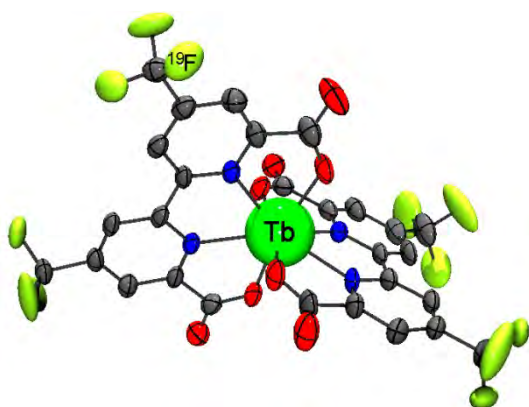
Michael Seitz

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>

T. Güden-Silber, K. Klein, M. Seitz, *Dalton Trans.* **42** (2013) 13882–13888. 4,4'-Bis(tri-fluoromethyl)-2,2'-bipyridine – a multipurpose ligand scaffold for lanthanoid-based luminescence/ ^{19}F NMR probes. (Featured in *Nachrichten aus der Chemie* **62** (2014) 246).



Magnetic resonance imaging (MRI) with paramagnetic gadolinium contrast agents is one of the most important tools of modern medical diagnostics. So far, clinical MRI almost exclusively relies on ^1H NMR, especially of ^1H nuclei in water molecules. Among the promising alternatives to proton NMR, ^{19}F NMR has great potential due its very favorable characteristics (sensitivity and resonance frequency comparable to ^1H , nuclear spin = $\frac{1}{2}$, 100% natural abundance of ^{19}F , etc.). One of the major obstacle for the clinical use of ^{19}F MRI are the long magnetic relaxation times ($T_1 \approx \text{sec}$)

which would require unrealistically high concentrations of fluorinated contrast agents. One approach toward solving this problem is the use of paramagnetic metal ions that are close to the ^{19}F nuclei and accelerate the relaxation process. This relaxation rate enhancement allows an increase of the number of scans per unit of time which in turn leads to an increase in sensitivity. In this context, we have developed paramagnetic, highly fluorinated terbium and dysprosium complexes. These exhibit greatly enhanced longitudinal ^{19}F relaxation with excellent magnetic properties. In addition, these model compounds also show efficient photoluminescence which makes them the first examples of contrast agents that could be used in a bimodal fashion using both ^{19}F MRI and luminescence imaging at the same time.

Magnetresonanztomographie (MRT) mit paramagnetischen Gadolinium-Kontrastmitteln ist eine der wichtigsten Werkzeuge für die moderne medizinische Diagnostik. Bislang bediente sich die klinische MRT fast ausschließlich der ^1H -NMR-Spektroskopie, insbesondere von ^1H -Kernen in Wassermolekülen. Unter den vielversprechenden Alternativen zu Protonen-NMR hat vor allem ^{19}F -NMR großes Potential aufgrund der sehr günstigen Eigenschaften (Empfindlichkeit und Resonanzfrequenz vergleichbar mit ^1H , Kernspin = $\frac{1}{2}$, 100% natürliche Häufigkeit von ^{19}F , etc.). Eines der Haupthindernisse für die klinische Anwendung von ^{19}F -MRT sind die langen magnetischen Relaxationszeiten ($T_1 \approx \text{sec}$), die unrealistisch hohe Konzentrationen an fluorierten Kontrastmitteln erfordern würden. Ein Ansatz zur Lösung dieses Problems ist die Verwendung von paramagnetischen Metallionen, die sich in der Nähe der ^{19}F -Kerne befinden und die Relaxation beschleunigen. Die Zunahme der Relaxationsraten erlaubt eine Erhöhung der Zahl der Messungen pro Zeiteinheit, was wiederum zu einer Verbesserung der Empfindlichkeit führt. In diesem Zusammenhang haben wir paramagnetische, hochfluorierte Terbium- und Dysprosiumkomplexe entwickelt. Diese zeigen stark beschleunigte longitudinale ^{19}F -Relaxation mit hervorragenden magnetischen Eigenschaften. Zudem besitzen diese Modellverbindungen effiziente Photolumineszenz was sie zu den ersten Beispielen für Kontrastmittel macht, die auf bimodale Weise gleichzeitig sowohl für ^{19}F -MRT, als auch für Lumineszenz-Imaging genutzt werden könnten.

Roland A. Fischer

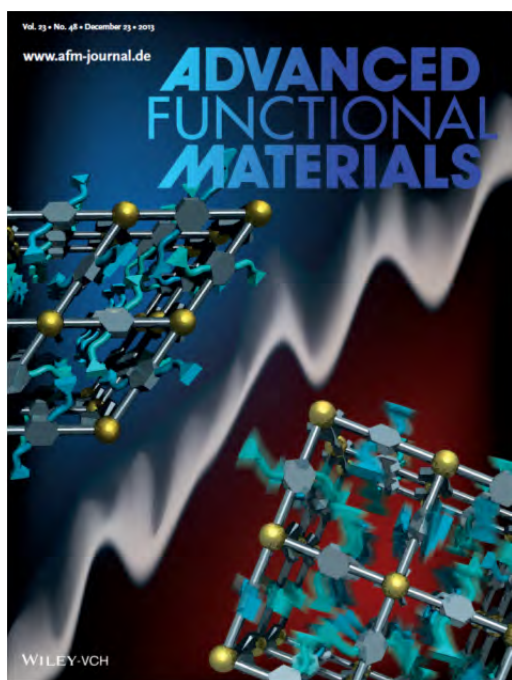
Anorganische Chemie-II - Organometallics & Materials Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: roland.fischer@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ac2/>

S. Henke, A. Schneemann, R. A. Fischer, *Adv. Funct. Mater.* **2013**, 48, 5990-5996. Massive anisotropic thermal expansion and thermo-responsive breathing in metal-organic frameworks modulated by linker functionalization.



The third-generation of Metal-Organic Frameworks (MOF) has been rising since its prediction in 1998 and the review article of Susumu Kitagawa and co-authors in *Angew. Chem.* 2004 (so far the journal's highest cited article of all times). These materials show responsivity of the structure upon external stimuli and are called "soft porous crystals" (SPCs). In 2013 we reported on tailoring the softness in MOFs of formula $[\text{Zn}_2(\text{fu-L})_2\text{dabco}]_n$. (fu-L =alkoxy functionalized 1,4-benzenedicarboxylate, dabco = 1,4-diazabicyclo[2.2.2]octane). Very large uniaxial positive and negative thermal expansion was discovered. The density change is more comparable to liquid water rather than any other known crystalline solid-state material. The thermo-responsive properties are precisely controlled by the choice and combination of the alkoxy-side chain substituted fu-Ls and depend on functional moieties and the chain lengths. Our combinatorial approach allows for a

targeted design of extreme thermo-mechanical properties of MOFs addressing the regime between crystalline solid matter and the liquid and solution state in confined space.

Flüssigkeiten reagieren sensibel auf Wärme oder Kälte. Je nach Art der Temperaturänderung steigt oder fällt der gefärbte Alkoholfaden im Thermometer. Hundertmal weniger empfindlich sind dagegen feste Stoffe, Beton oder Stahl zum Beispiel. Dennoch kommt kein Bauwerk ohne Dehnungsfugen aus. Besonders ungewöhnlich verhält sich Wasser, denn es dehnt sich beim Gefrieren aus. Eis schwimmt, Seen frieren von der Oberfläche her zu, und bei 4 °C hat Wasser seine größte Dichte. Kann es feste Stoffe geben, die sich wie Flüssiges verhalten, wenn ihnen heiß oder kalt wird? Und wenn das möglich wäre, was könnte man damit anfangen? Wir haben einen Trick angewandt, um die thermische Expansionsfähigkeit von so genannten Metal-Organischen Netzwerken (MOFs) gezielt zu erhöhen. An den geordneten, organischen Baueinheiten des festen Rahmenwerkes wurden zusätzliche Molekülgruppen angebracht. Diese füllen die nanometer-großen Porenräume des Netzwerks teilweise aus. Die Gruppen verhalten sie sich wie eine ungeordnete Flüssigkeit, aber sie können wegen der Bindung an die Porenwände den Raum nicht verlassen. So überträgt sich ihre Wärme-bewegung auf das Netzwerk. Beim Erwärmen bläht sich das feste Material schlagartig um ca. 20% auf. Jedoch bleibt seine kristalline Eigenschaft erhalten. Der Vorgang ist vollständig umkehrbar. Temperaturabhängige Röntgenbeugung und kalorimetrische Messungen ergaben extrem große thermische Expansionskoeffizienten, wie man sie bisher nur von Flüssigkeiten kannte, nicht aber von Feststoffen. Anwendungen in der Wärmespeicherung und -übertragung sowie der Sensorik sind denkbar (zitiert nach RUB Presseinformation 19.02.2014).

Anjana Devi

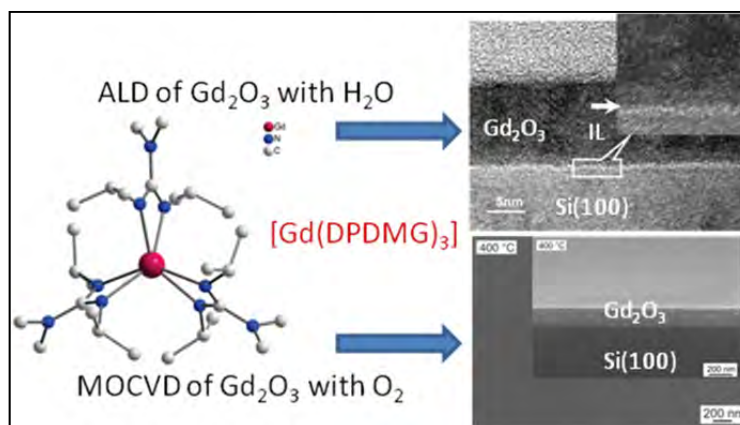
AG Chemie Anorganischer Materialien; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

A. Devi, *Coord. Chem. Rev.* **257** (2013) 3332 – 3384. ‘Old Chemistries’ for new applications: Perspectives for development of precursors for MOCVD and ALD applications

The concept of the transformation of molecules to materials has been well established in the field of chemical vapor deposition (CVD) and atomic layer deposition (ALD). New materials have become an integral part of modern day technology especially in the field of microelectronics and optoelectronics. The importance of CVD and ALD processes for high throughput and coating on complex device geometries is well recognized for these applications. A wide range of precursors for CVD and ALD can be used to realize specific class of materials but the trend recently has been driven by the reduced thermal budget needed especially for components employed in microelectronics and optoelectronics. The chronological developments in precursors for CVD/ALD point out that ‘designer precursors’ are set to play a major role in the field of materials engineering. In this review article, the concept of utilizing ‘old chemistries’ for new CVD and ALD applications is highlighted focussing on some representative functional materials, namely group IV and rare earth oxides, and the recent results on precursor development carried out in the Inorganic Materials Chemistry research group at Bochum, Germany are summarized.



Chemical Vapor Deposition (CVD) und Atomic Layer Deposition (ALD) sind gängige Techniken zur Umwandlung von Molekülen in Materialien. Ihnen werden u.a. hohe Durchsatzraten und die Möglichkeit zur Beschichtung von komplexen Bauelementen zugesprochen. Insbesondere in der Mikro- und Optoelektronik sind neue Materialien ein fester Bestandteil der modernen Technik geworden. In der Regel steht zwar eine große Auswahl an Precursoren für CVD und ALD zur Herstellung einer bestimmten Materialklasse zur Verfügung, allerdings werden die Prozesstemperaturen gerade durch die neuesten Entwicklungen in der Mikro- und Optoelektronik limitiert. Der zeitliche Verlauf der Precursoren-Entwicklung für CVD/ALD-Anwendungen lässt darauf schließen, dass „Designer-Precursoren“, sprich maßgeschneiderte Verbindungen, zukünftig eine tragende Rolle im Bereich der Werkstoffherstellung spielen werden. Im Rahmen dieses Review-Artikels soll das Konzept der Verwendung "alter Chemie" (= bekannter Verbindungen) für CVD- und ALD-Anwendungen näher erläutert werden. Hierbei liegt der Fokus auf einigen repräsentativen Funktionsmaterialien, wie Oxiden der Gruppe IV und der seltenen Erden, sowie auf den neuesten Forschungsergebnissen der Precursoren-Entwicklung der *Inorganic Materials Research* Gruppe aus Bochum, Deutschland.

Rochus Schmid

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2; AG Computational Materials Chemistry;

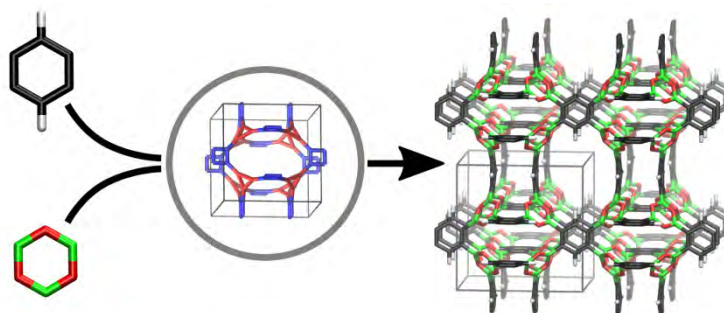
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

S. Bureekaew, R. Schmid, *Cryst. Eng. Comm.* **15** (2013) 1551-1562. Hypothetical 3D-Periodic Covalent Organic Frameworks: Exploring the Possibilities by a First Principles Derived Force Field

The main concept to understand the specific structure porous framework materials like metal-organic frameworks (MOFs) or their covalent organic framework (COF) counterparts is the topological analysis of the underlying network. In this approach the atomistic structure is reduced or “deconstructed” to reveal the topology of its network, formed by vertices connected by edges. We have now developed a theoretical procedure to reverse this process in order to predict network structures. We use different known network topologies as starting point and use our first principles derived force field MOF-FF for optimizing the energy of a given starting structure. The main ingredient is, however, the notion of isorecticular isomers arising in cases where the symmetry of the building block is lower than the symmetry of the network vertex. Here, a genetic algorithm based global search strategy is used to identify the optimal isomer. By this reversed topological approach (RTA) we can thus construct yet unknown systems *in silico*. In this contributions we have for the first time predicted structure and properties of different hypothetical 3D-periodic COFs, formed from a set of boronic-acid containing monomers.



Das wesentliche Konzept zum Verständnis der spezifischen Struktur von porösen Netzwerkverbindungen wie metall-organischer Netzwerke (MOFs) oder deren kovalent-organischer Pendanten (COFs) ist die topologische Analyse des zugrundeliegenden Netzwerkes. Bei dieser Methode wird die atomistische Struktur reduziert oder „dekonstruiert“ um die Topologie des Netzwerkes aufzuzeigen, die durch kantenverknüpfte Vertices gebildet wird. Wir haben nun eine theoretische Prozedur entwickelt um diesen Prozess umzukehren und damit die Netzwerkstruktur vorherzusagen. Wir benutzen bekannte Netzwerk-Topologien als Ausgangspunkt und unser *ab initio* parametrisiertes Kraftfeld MOF-FF zur energetischen Optimierung einer gegebenen Startstruktur. Der wesentliche Aspekt ist aber die Erkenntnis, dass durch Baueinheiten mit niedrigerer Symmetrie als die entsprechenden Symmetrien der Netzwerkvertices isorectikuläre Isomere auftreten können. Hier verwenden wir einen genetischen Algorithmus um das globale Minimum dieser Isomere zu identifizieren. Mit diesem reversen topologischen Ansatz (RTA) sind wir somit in der Lage auch bisher unbekannte Systeme *in silico* zu konstruieren. In diesem Beitrag haben wir erstmals Strukturen und Eigenschaften verschiedener hypothetischer 3D-periodischer COFs, die aus einem Satz von boronsäurebasierten Monomeren gebildet werden können, untersucht.

Radim Beránek

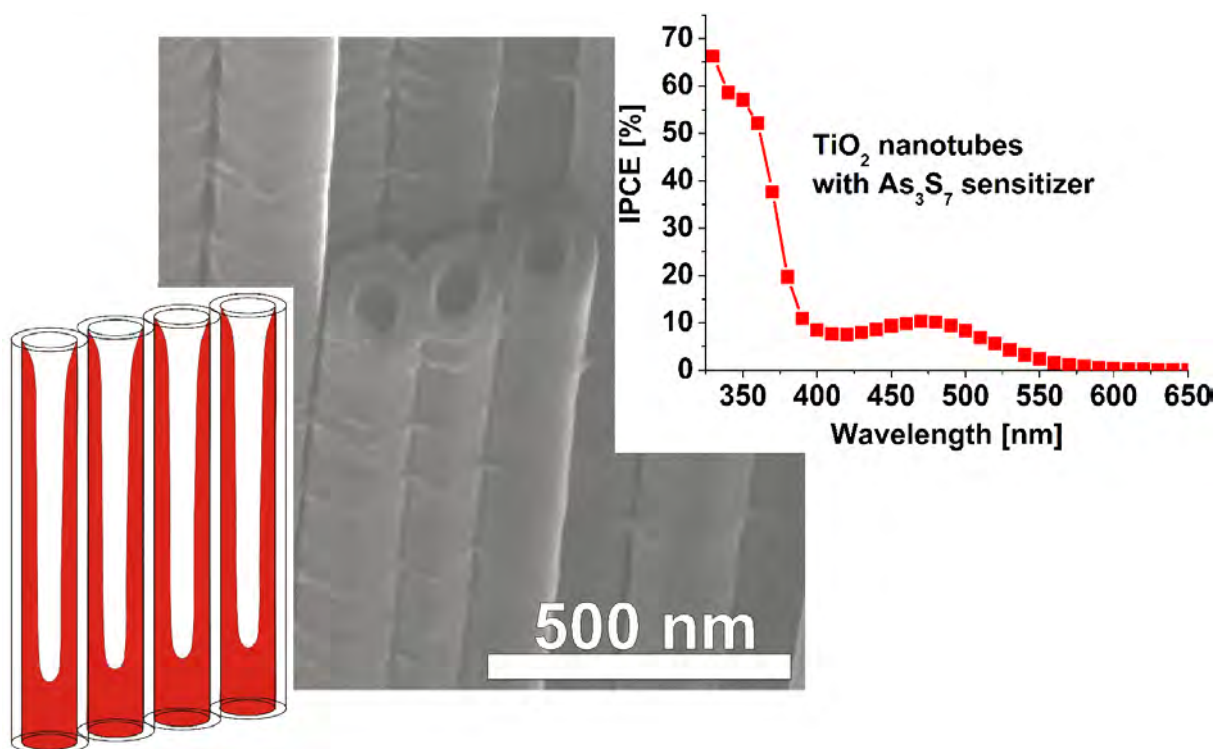
Anorg. Chem. II - Photoactive Materials; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

J. Macak, T. Kohoutek, L. Wang, R. Beranek, *Nanoscale* 5 (2013) 9541-9545. Fast and robust infiltration of functional material inside titania nanotube layers: case study of a chalcogenide glass sensitizer.

The fabrication of novel photoactive architectures has attracted significant interest motivated by the need to develop alternative systems for efficient conversion of solar energy. Recently we collaborated with researchers from the University of Pardubice (Czech Republic) in development of photoactive composites based on sensitized TiO₂ nanotubes. Fast and robust infiltration of anodic TiO₂ nanotube layers by a model chalcogenide As₃S₇ glass via spin-coating was reported for the first time. The effective sensitization led to significant photocurrent response in the visible light. The easy and cheap infiltration method can be extended for deposition of other light absorbers into nanotubular layers.



Die Herstellung von neuartigen photoaktiven Materialien ist von grundlegender Bedeutung für Entwicklung von alternativen Systemen für effiziente Umwandlung von Sonnenenergie. Vor kurzem haben wir in Zusammenarbeit mit Forschern aus der Universität Pardubice (Tschechien) an der Entwicklung von photoaktiven Kompositen auf Basis von sensibilisierten TiO₂-Nanoröhren gearbeitet. Es konnte gezeigt werden, dass TiO₂-Nanoröhren schnell und nachhaltig mittels Spincoatings mit As₃S₇-Chalkogenidglas infiltriert werden können. Die effektive Sensibilisierung führte zu erhöhten Photoströmen im sichtbaren Licht. Die einfache und günstige Infiltrationsmethode kann auch für die Abscheidung anderer Lichtabsorber in die TiO₂-Nanoröhren benutzt werden.

Anja-Verena Mudring

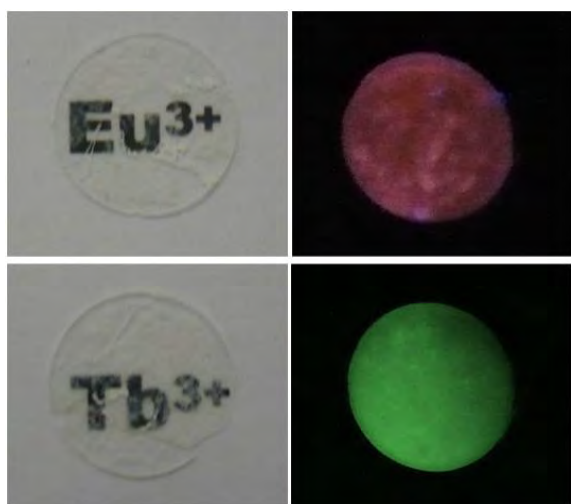
Inorganic Chemistry III – Materials Engineering and Characterization;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

P.S. Campbell, C. Lorbeer, J. Cybinska, A.-V. Mudring, *Adv. Func. Mat.* **23** (2013) 2924-2931. One-Pot Synthesis of Luminescent Polymer-Nanoparticle Composites from Task-Specific Ionic Liquids.



Lanthanide containing materials are becoming more and more essential in our every-day lives. They present strong and distinct luminescent behavior resulting from 4f electronic energy levels which are little affected by their chemical environments, due to the effective shielding of the f electrons by the filled 5s and 5p external sub-shells. This makes them essential in applications such as energy conversion phosphors for compact fluorescent lamps (CFLs) and light emitting diodes (LEDs), comprising the energy efficient alternatives to incandescent lamps. In such applications, thin films of luminescent lanthanide materials are used as coatings. One

strategy to achieve processable luminescent materials for direct application is through the doping of a flexible matrix with lanthanides. To this end, Ln^{3+} -complexes have been incorporated into organic polymers, liquid crystals and sol-gel derived organic-inorganic hybrids. Polymers offer several advantages for the development of materials, such as: flexibility, versatility, optical quality and moderate processing conditions. We used a multi-functional polymerisable ionic liquid, diallyldimethylammonium tetrafluoroborate (DADMA BF_4) in a one-pot synthesis of novel luminescent polymer-nanoparticle composites. Firstly, small monodisperse lanthanide fluoride nanoparticles are formed by microwave irradiation in the presence of $\text{Ln}(\text{OAc})_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Ln} = \text{Gd}, \text{Eu}, \text{Tb}$; $\text{OAc} = \text{acetate}$) in the ionic liquid. The nanoparticles can be precipitated for structural characterization (PXRD, TEM) or kept in the solution which yields after irradiation by high intensity UV light colorless, processable polymer materials with good photophysical properties.

Lanthanid-basierte Materialien werden immer wichtiger in unserem Alltagsleben. Sie zeigen hervorragenden Lumineszenzverhalten aufgrund der elektronischen 4f-Zustände, die nur wenig von der chemischen Umgebung beeinflusst werden. Dies führt dazu, dass Lanthanid-Ionen in Energiekonversionsphosphoren essentieller Bestandteil für Energiesparlampen und LEDs geworden sind, welches die Energie-effizienten Beleuchtungsmittelalternativen zur klassischen Glühbirne darstellen. Hier werden dünne Filme Lanthanid-basierter Materialien als Beschichtungen verwendet. Eine Strategie zur Herstellung gut prozessierbarer lumineszierender Materialien ist die direkte Dotierung in eine flexible Matrix wie einem Polymer. Wie haben ausgehen von einer polymerisierbaren Ionischen Flüssigkeit, Diallyldimethylammonium tetrafluoroborate (DADMA BF_4) und entsprechenden Lanthanid-Vorläuferverbindungen, in einer Eintopfsynthese neue Polymer-Nanopartikelkomposite mit hervorragenden optischen Eigenschaften erhalten können.

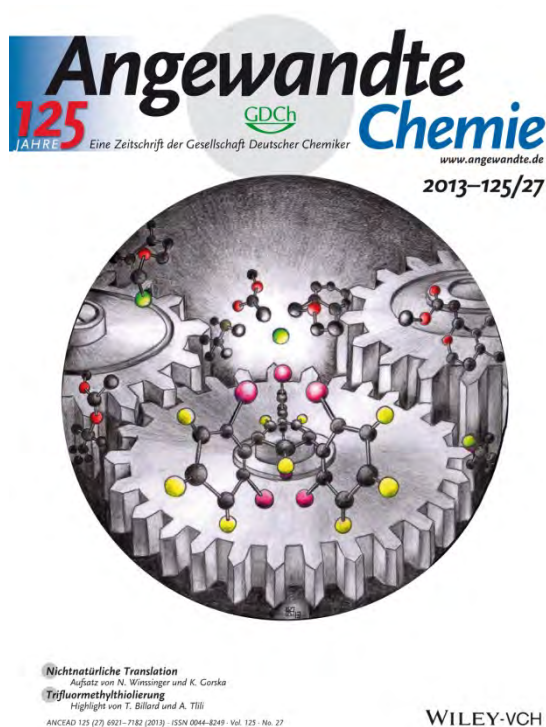
Stefan M. Huber

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

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

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

F. Kniep, S.H. Jungbauer, Q. Zhang, S.M. Walter, S. Schindler, I. Schnapperelle, E. Herdtweck, S.M. Huber, *Angewandte Chemie* **125** (2013) 7166-7170. Organokatalyse mit neutralen multidentaten Halogenbrückendonoren



Halogen bonds are non-covalent interactions which are very similar to hydrogen bonds, but have been used very little in organic synthesis. In the last years, our group had successfully used cationic halogen-bond donors (halogen-based Lewis acids) as stoichiometric activators in a benchmark reaction. In the publication at hand, we report the use of neutral perfluorinated halogen-bond donors as catalysts in the reaction of chloro isochroman with ketene silyl acetals. The halogen-bond donors were recycled internally by reaction with a silyl group that was also liberated during the reaction. The analogous non-iodinated compounds were not active, and traces of acids could also be ruled out as the actual source of the catalytic activity. Overall, this represents the first use of halogen-bond donors as organocatalysts, in which halogen bonds could indeed be established as being responsible for the catalytic activity.

Halogenbrücken sind nicht-kovalente Wechselwirkungen, die den Wasserstoffbrücken sehr ähnlich sind, aber bisher noch kaum in der organischen Synthese eingesetzt wurden. Unsere Gruppe hatte in den letzten Jahren Halogenbrückendonoren (halogenbasierte Lewis-Säuren) erfolgreich als stöchiometrisch zugesetzte kationische Aktivatoren in einer Testreaktion eingesetzt. In der vorliegenden Arbeit gelang nun der Einsatz neutraler perfluorierter Halogenbrückendonoren als Katalysatoren der Reaktion von Chlorisochroman mit Ketensilylacetallen. Die Halogenbrückendonoren wurden dabei intern durch Reaktion mit einer im Lauf der Reaktion freigesetzten Silylgruppe recycelt. Die analogen nichtiodierten Verbindungen waren nicht aktiv, und Säurespuren konnten als Ursache der katalytischen Aktivität ebenfalls ausgeschlossen werden. Somit konnte erstmalig gezeigt werden, dass die katalytische Aktivität der Halogenbrückendonoren tatsächlich auch auf der Ausbildung von Halogenbrücken beruht.

Wolfram Sander

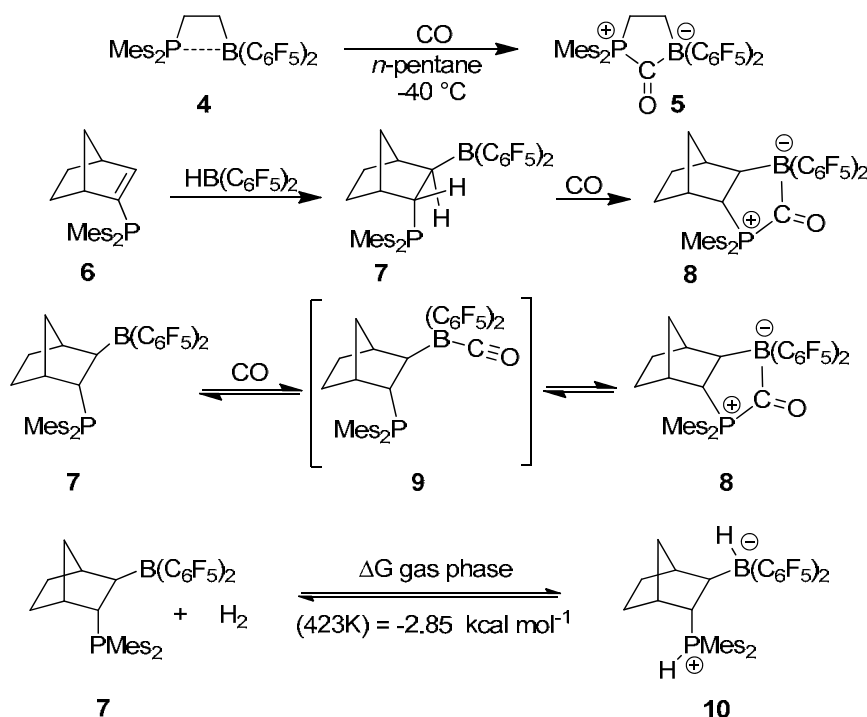
Lehrstuhl für Organische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

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

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

M. Sajid, A. Lawzer, W. Dong, C. Rosorius, W. Sander, B. Schirmer, S. Grimme, C. G. Daniiluc, G. Kehr, G. Erker, *J. Am. Chem. Soc.* **135** (2013), 18567-18574. Carbonylation Reactions of Intramolecular Vicinal Frustrated Phosphine / Borane Lewis Pairs

The intramolecular frustrated Lewis pair (FLP) $\text{Mes}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_2$ **4** adds cooperatively to carbon monoxide to form the five-membered heterocyclic carbonyl compound **5**. The intramolecular FLP **7** contains an *exo*-3- $\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_2$ Lewis acid and an *endo*-2- PMes_2 Lewis base functionality coordinated at the norbornane framework. This noninteracting FLP adds carbon monoxide in solution at -35°C cooperatively to yield a five-membered heterocyclic FLP-carbonyl compound **8**. In contrast, FLP **7** is carbonylated in a CO-doped argon matrix at 25 K to selectively form a borane carbonyl **9** without involvement of the adjacent phosphanyl moiety. The free FLP **7** was generated in the gas phase from its FLPH_2 product **10**. A DFT study has shown that the phosphonium hydrido borate zwitterion **10** is formed exergonically in solution but tends to lose H_2 when brought into the gas phase.



Das intramolekular frustrierte Lewispaar (FLP) $\text{Mes}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_2$ **4** bindet Kohlenmonoxid unter Bildung einer fünfringig heterocyclischen Carbonylverbindung **5**. Das intramolekulare FLP **7** enthält eine *exo*-3- $\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_2$ Lewissäuren- und eine *endo*-2- PMes_2 Lewisbasenfunktionalität, die am Norbornangerüst koordiniert sind. Dieses nichtwechselwirkende FLP addiert kooperativ Kohlenmonoxid in Lösung bei -35°C und bildet eine fünfringig heterocyclische FLP-Carbonylverbindung **8**. In einer CO-dotierten Matrix bei 25 K wird **7** dagegen carbonyliert, um selektiv eine Borancarbonyl **9** zu formen, ohne Einfluss der benachbarten Phosphanyleinheit. Das freie FLP **7** wurde in der Gasphase von seinem FLPH_2 -Produkt **10** gewonnen. Eine DFT-Studie hat gezeigt, dass das Phosphoniumhydridoborat-Zwitterion **10** in Lösung exergonisch gebildet wird, aber dazu tendiert, H_2 zu verlieren, wenn es in die Gasphase gerät.

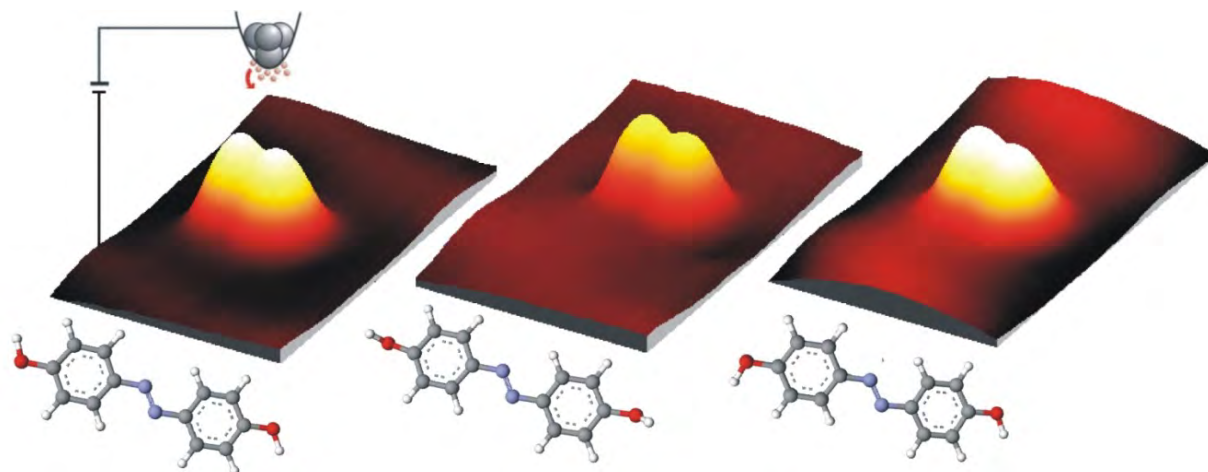
Karina Morgenstern

Lerhstuhl für physikalische Chemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3225229; FAX: ++49-(0)234-32

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

J. Henzl, K. Boom, K. Morgenstern, *J. Am. Chem. Soc.* **135** (2013) 11501-11504. Reorientation of a Single Bond within an Adsorbed Molecule by Tunneling Electrons



Scanning tunneling microscopy offers the exciting possibility to manipulate individual molecules via vibrational excitation via inelastically tunneling electrons. The electrons transfer energy into vibrational molecular modes leading to breakage or formation of individual bonds. It is challenging to precisely control intramolecular changes by this process. We demonstrated for di-hydroxy-azobenzene adsorbed on Au(111) and on Ag(111) that the manipulation facilitates to rotate the OH end groups around the C-O bond between meta-stable states, which corresponds to a reorientation of the hydrogen; the ultimate limit of a conformational change within a molecule.

Mittels Rastertunnelmikroskopie ist es möglich, einzelne Moleküle dadurch zu manipulieren, dass über die Wechselwirkung mit inelastisch tunnelnden Elektronen molekulare Schwingungen angeregt werden. Durch diese Elektronen kann in die Schwingungsmoden ausreichend Energie transferiert werden, um einzelne Bindungen zu bilden oder zu brechen. Die Herausforderung besteht darin, intramolekularen Änderungen präzise zu kontrollieren. Wir haben anhand von auf Au(111) oder Ag(111) adsorbiertem di-hydroxy-Azobenzol gezeigt, dass diese Art der Manipulation eine Rotation der OH-Endgruppe um die C-O Bindung zwischen verschiedenen metastabilen Zuständen erlaubt. Dies entspricht der Reorientierung eines Wasserstoffatoms und somit der kleinstmöglichen Konformationsänderung innerhalb eines Moleküls.

Christian Herrmann

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

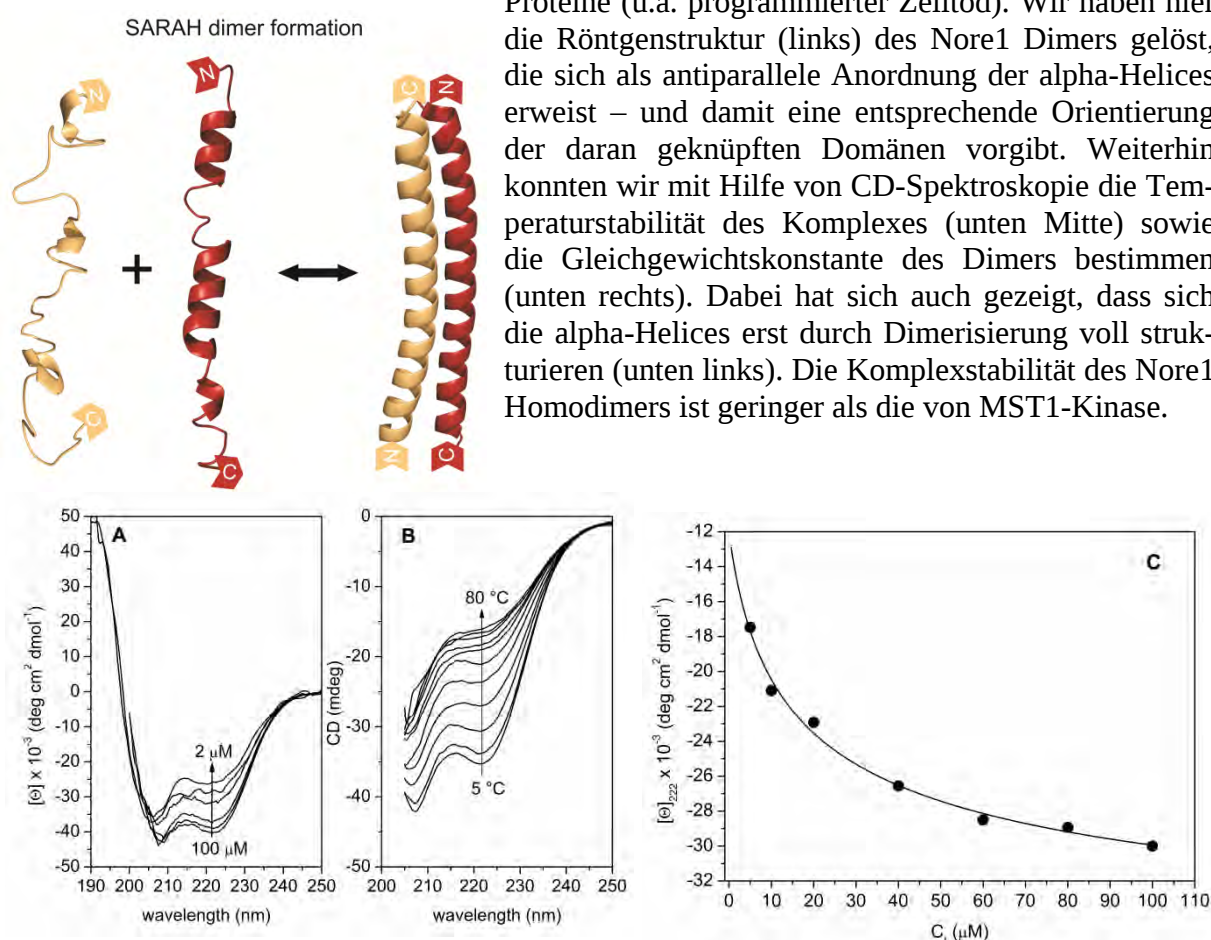
Tel.: ++49-(0)234-3224173; FAX: ++49-(0)234-3214785

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

C. Makbul, D. C. Aruxandei, E. Hofmann, D. Schwarz, E. Wolf, C. Herrmann, *Biochemistry* **52** (2013) 1045-1054. Structural and thermodynamic characterization of Nore1-SARAH: a small, helical module important in signal transduction networks.

Der Tumor Suppressor Nore1 (Novel Ras effector 1) gehört zur Ras Assoziation Proteinfamilie (Rassf). Dieses Protein ist beteiligt an einem komplexen Gleichgewicht zwischen Homodimeren und heterodimeren Interaktionen mit anderen Rassf-Proteinen und MST1-Kinase. All diese Komplexe werden durch ein *coiled coil* der sog. SARAH (Sav/Rassf/Hpo) Domänen etabliert, und die heterodimeren Zustände sind verantwortlich für die zelluläre Funktion dieser

Proteine (u.a. programmierter Zelltod). Wir haben hier die Röntgenstruktur (links) des Nore1 Dimers gelöst, die sich als antiparallele Anordnung der alpha-Helices erweist – und damit eine entsprechende Orientierung der daran geknüpften Domänen vorgibt. Weiterhin konnten wir mit Hilfe von CD-Spektroskopie die Temperaturstabilität des Komplexes (unten Mitte) sowie die Gleichgewichtskonstante des Dimers bestimmen (unten rechts). Dabei hat sich auch gezeigt, dass sich die alpha-Helices erst durch Dimerisierung voll strukturieren (unten links). Die Komplexstabilität des Nore1 Homodimers ist geringer als die von MST1-Kinase.



The tumor suppressor Nore1, its acronym coming from Novel Ras effector, is one of the members of the Rassf (Ras association domain family) protein family. It forms homo- and hetero-complexes through its C-terminal SARAH (Sav/Rassf/Hpo) domain. The oligomeric state of Nore1 and that of other SARAH domain containing proteins is important for their cellular activities. In this study, we show that the recombinant SARAH domain of Nore1 crystallizes as an antiparallel homodimer with representative characteristics of coiled coils. The heptad register is interrupted by two stutters. In addition, we show that the SARAH domain of Nore1 undergoes association-dependent folding. The Nore1 homodimer has a lower affinity and thermodynamic stability than the MST1 homodimer. Our results indicate that the SARAH helices act as dimerisation domains for MST and Rassf proteins.

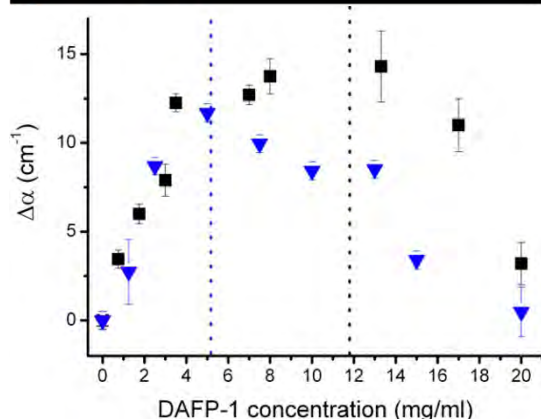
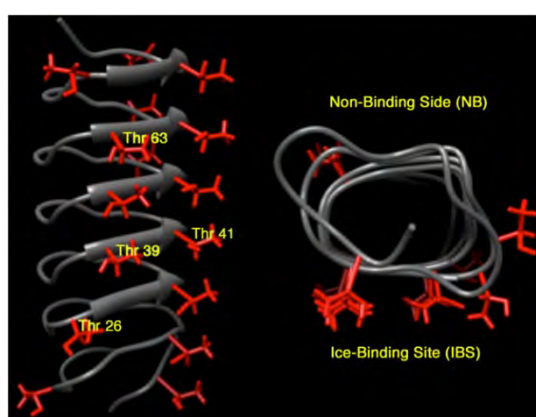
Martina Havenith

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

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

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

K. Meister, S. Ebbinghaus, Y. Xu, J. G. Duman, A. DeVries, M. Gruebele, D. M. Leitner, M. Havenith, *PNAS* **110** (2013) 1617-1622. Long-range protein–water dynamics in hyperactive insect antifreeze proteins



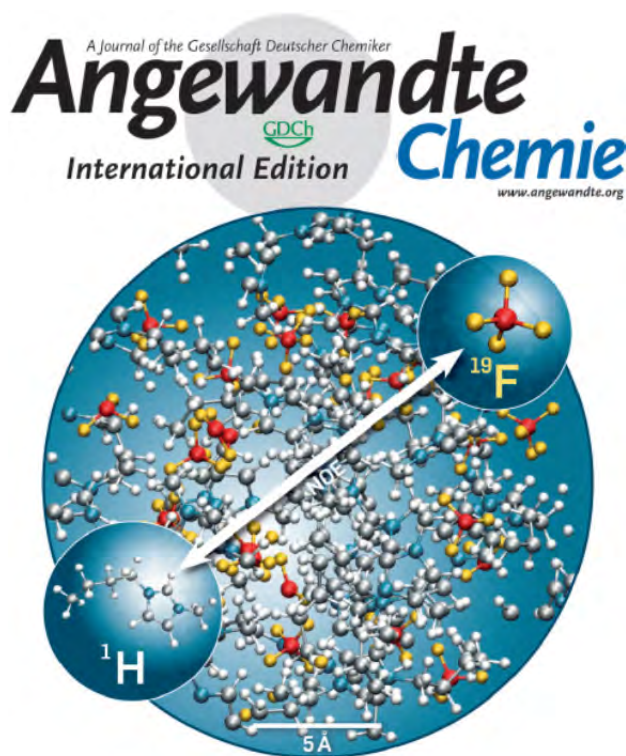
THz-Absorptionsspektroskopie und Molekulardynamiksimulationen zeigten, dass langreichweitige Protein-Wasser-Wechselwirkungen ein wesentlicher Bestandteil im Wirkungsmechanismus von Insekten-AFPs sind.

Antifreeze proteins (AFPs) are a class of proteins that suppresses ice growth in polar fish, insects, bacteria, and plants and thereby enables their survival in subfreezing habitats. AFPs depress the freezing temperatures of ice growth of a solution without depressing the melting point equilibrium of protein solutions. In one proposed mechanism freezing point depression is achieved by an adsorption-inhibition mechanism, in which the proteins recognize and bind “quasi-irreversibly” to an ice surface. A different mechanism proposed by us for antifreeze glycoprotein (AFGP) is the presence of an extended dynamic hydration shell with retardation in the H-bond network dynamics (long-range hypothesis). Concentration dependent THz absorption spectroscopy is a suitable method to probe the range where hydration dynamics around proteins is changed compared to bulk water dynamics. Here, we investigated a hyperactive AFP from the fire-colored beetle *Dendroides canadensis* (DAFP-1, see figure). Combining terahertz spectroscopy and molecular dynamic simulations, we were able to show that long-range protein–water interactions play an important role in explaining the hyperactive antifreeze activity of insect AFPs.

Hermann Weingärtner

Phys. Chem. II. – Physikalische Chemie der Flüssigkeiten;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3225535; FAX: ++49-(0)234-3214293
email: hermann.weingaertner@rub.de

S. Gabl, O. Steinhauser, H. Weingärtner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 9242-9246 (cover paper). From short-range to long-range intermolecular NOEs in ionic liquids: Frequency does matter.



The nuclear Overhauser effect (NOE) reflects cross-relaxation between two nuclear spins due to magnetization transfer through coupling of their magnetic dipole moments. With increasing distance r of the spins, the cross-relaxation rate decays as $1/r^6$. A notable NOE is therefore only expected, if this distance is less than 4–5 Å. This specificity to local interactions forms the conceptual basis of NOE spectroscopy for determining molecular structures. While derived for spins in the same molecule, a rule like this is also widely applied to *intermolecular* cross-relaxation. Based on a new model theory we have analyzed the spatial range of the intermolecular NOE in Ionic Liquids. The spatial range undergoes a transition from a long-range, $1/r$ -dependent nature at low frequency to a short-range, $1/r^6$ -dependent character at high frequencies. The experimentally accessible cross-relaxation rate

involves contributions from both regimes, but the long-range component dominates, prospecting information about intermolecular structures up to typical distances of 20 – 30 Å.

Der Nuclear Overhauser Effect (NOE) spiegelt die Kreuzrelaxation zweier Kernspins durch Magnetisierungsübertrag aufgrund der Kopplung ihrer magnetischen Dipolmomente wider. Mit zunehmendem Abstand r der Spins zerfällt die Kreuzrelaxationsrate proportional zu $1/r^6$. Ein merklicher Effekt tritt daher nur auf, wenn der Abstand der Spins weniger als 4–5 Å beträgt. Diese Spezifität auf lokale Wechselwirkungen bildet die Grundlage der NOE-Spektroskopie zur Bestimmung molekularer Strukturen. Obwohl dieser Sachverhalt nur für Spins innerhalb desselben Moleküls hergeleitet ist, wird eine derartige Regel auch weithin auf intermolekulare Kreuzrelaxation angewandt. Mit Hilfe einer neuen Theorie haben wir die Reichweite des intermolekularen NOEs in Ionischen Flüssigkeiten untersucht. Diese durchläuft einen Übergang von einem $1/r$ -abhängigen, langreichweitigen Verhalten bei niedrigen Messfrequenzen zu einem $1/r^6$ -abhängigen, kurzreichweitigen Verhalten bei hohen Frequenzen. Die messbare Kreuzrelaxationsrate enthält Beiträge beider Bereiche, wobei die langreichweitige Komponente dominiert. Dabei sind Information über intermolekulare Strukturen bis zu typischen Abständen von 20 – 30 Å zu erwarten.

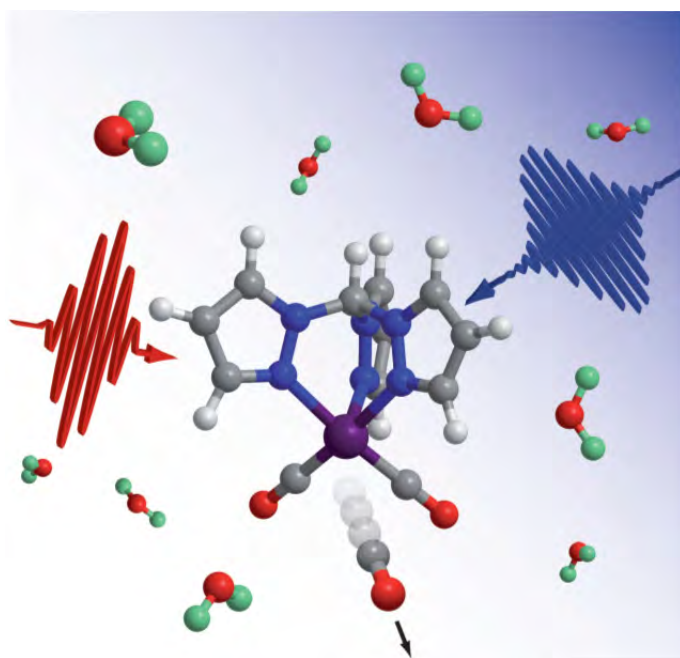
Patrick Nuernberger

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

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

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

P. Rudolf, F. Kanal, J. Knorr, C. Nagel, J. Niesel, T. Brixner, U. Schatzschneider, P. Nuernberger, *J. Phys. Chem. Lett.* **4** (2013) 596-602. Ultrafast photochemistry of a manganese-tricarbonyl CO-releasing molecule (CORM) in aqueous solution



A selective photolysis can be the start of intriguing photochemical processes or the initial step for the release of a useful substance from a larger compound. In certain cases, even several bonds can be broken, as was previously shown for a manganese-tricarbonyl carbon-monoxide-releasing molecule (CORM), a water-soluble compound with promising applications in biology, which can release several CO ligands upon illumination. In order to investigate the underlying mechanism of the reaction as well as its characteristic time scale, we followed the light-induced dynamics in real time by probing the molecule's vibrational signatures.

Our studies with femtosecond (10^{-15} s) laser pulses revealed that an excitation by ultraviolet light leads to the liberation of just one CO, while some excited molecules even retain all ligands. The water environment now rapidly quenches the molecular dynamics initiated by the ultraviolet photon: after a few picoseconds (10^{-12} s), all the excess vibrational energy is already gone. Hence, the initial process is a truly ultrafast breakup, leaving the newly-formed dicarbonyl waiting for a further incentive to release more CO.

Eine gezielte Photolyse kann der Auftakt für faszinierende photochemische Prozesse sein oder der erste Schritt hin zur Gewinnung einer nützlichen Substanz aus einer größeren Verbindung. In vielen Fällen können sogar mehrere Bindungen photolytisch aufgespalten werden, so wie es bereits für ein Mangan-Tricarbonyl CORM („carbon monoxide releasing molecule“) demonstriert wurde, eine wasserlösliche Verbindung mit vielversprechenden Anwendungen in der Biologie, die unter Beleuchtung mehrere CO-Liganden freisetzen kann. Um den zugrundeliegenden Mechanismus und die charakteristischen Zeitskalen der Reaktion offenzulegen, haben wir die lichtinduzierte Dynamik über die Schwingungsbanden des Moleküls in Echtzeit mitverfolgt.

Unsere Studien mit Laserpulsen im Femtosekundenbereich (10^{-15} s) konnten enthüllen, dass eine Anregung mit ultraviolettem Licht nur zur Freisetzung von einem CO-Liganden führt, für einige angeregte Moleküle verbleiben sogar alle Liganden am CORM. Die Kopplung an die Wasserumgebung sorgt nun für ein schnelles Abklingen der Dynamik im Molekül: nach einigen Pikosekunden (10^{-12} s) ist die gesamte Überschussenergie ans Lösungsmittel abgegeben. Es handelt sich bei den primär einsetzenden Prozessen um eine ultraschnelle Photolyse, wobei das neugebildete Dicarbonyl zurückbleibt und es zusätzlicher Stimuli bedarf, um weiteres CO freizusetzen.

Christian W. Müller

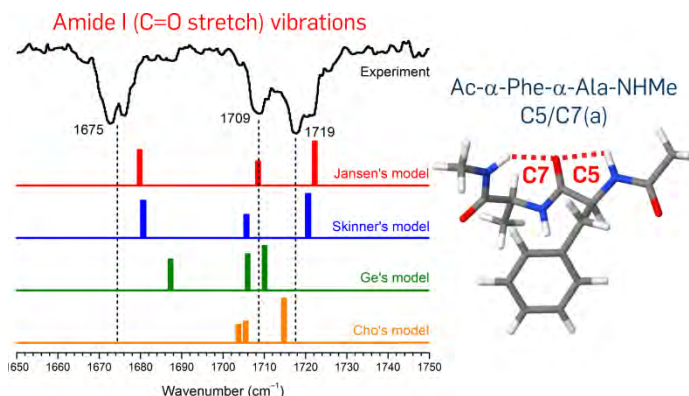
Physikalische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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>

C.W. Müller, Einzelkonformationsspektroskopie, *GIT Labor-Fachzeitschrift* 5 (2013) 291–293.

Anders als herkömmliche spektroskopische Methoden in der flüssigen oder gasförmigen Phase gestattet die Einzelkonformationsspektroskopie die Bestimmung der UV-, IR- und Raman-Spektren einzelner Molekülkonformere und mikrosolvatisierter Clusterisomere. Diese einzigartige Konformationsspezifität wird durch die Kombination der Molekülstrahltechnik mit laserspektroskopischen UV-UV-, IR-UV- und Raman-UV-Doppelresonanzmethoden ermöglicht. Die experimentelle Bestimmung der Konformationsstrukturen kleiner Peptidbausteine und ihrer Solvens-Cluster beispielsweise bietet die Gelegenheit zur Verfolgung zahlreicher langfristiger Ziele. Zu diesen Zielen zählt die Überprüfung und Verbesserung elektrostatischer Modelle zur Sekundärstrukturabhängigkeit von IR-Spektren im charakteristischen Amid-I-Bereich (s. Abb.). Bei diesen Modellen handelt es sich um Weiterentwicklungen des herkömmlichen Übergangsdipol-Kopplungsmodells, die einesteils auf Grundlage von IR-Spektren in Lösung (Skinners Modell), anderenteils anhand von Dichtefunktionalrechnungen der Wassercluster kleiner Peptid-Modelle entwickelt wurden (Jansens, Ges und Chos Modell). Die Einzelkonformationsspektroskopie bietet dabei erstmalig die Gelegenheit, diese Modelle anhand experimenteller konformationsspezifischer und residuen aufgelöster IR-Spektren zu testen und verbessern. Ebenso gestattet die Einzelkonformationsspektroskopie die isomerspezifische Bottom-Up-Untersuchung solvatochromischer Frequenz-verschiebungen von IR-Banden und die lösungsmittelinduzierte Modulation der Amid-I-Kopplungskonstanten in Solvens-Solvat-Clustern zunehmender Größe.



Molecular beam single-conformation spectroscopy provides the unique opportunity to disentangle the UV, IR, and Raman spectra of individual conformers from a mixture of conformers. Experimentally, single-conformation spectroscopy consists of a series of single- and double-resonance laser spectroscopic experiments that are carried out successively and that afford vibrationally state-selective,

mass-resolved, and conformer-specific UV, IR, and Raman spectra of cold, isolated molecules and microsolvated clusters in molecular beams. First in the succession of experiments, the mass-selected UV spectrum is recorded via resonantly enhanced two-photon ionization. In a second step, the UV spectrum is dissected into its underlying single-conformation UV spectra via UV–UV hole-burning spectroscopy. These single-conformation UV spectra provide conformation-specific electronic/vibronic transitions that serve as “monitor” transitions in the determination of single-conformation IR and Raman spectra. The assignment of these spectra through ab initio and density functional theory calculations allows to determine the conformational preferences of isolated flexible molecules and the isomeric structures of their microsolvated complexes.

Wolfgang Schuhmann

Analytische Chemie – Zentrum für Elektrochemie (CES); Ruhr-Universität Bochum,
Universitätsstr. 150; 44780 Bochum; Germany
Tel.: ++49-(0)234-3226200; FAX: ++49-(0)234-3214683
email: wolfgang.schuhmann@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/elan>

L. Stratmann, M. Gebala, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **13** (2013) 2198-2207. A chemical lift-off process. Removing non-specific adsorption in an electrochemical Epstein-Barr-Virus immunoassay



Upon contact of sensor surfaces with complex biological samples containing a variety of different proteins non-specific adsorption is hampering high-sensitive detection of the analyte in question. In order to substantially decrease the impact of non-specific adsorption at thiol-based self-assembled monolayers a chemical lift-off process is introduced. A sequence of local hydrolysis of isooctyl 3-mercaptopropionate, covalent binding of an antigen against the Epstein-Barr-Virus, stepwise incubation with a serum sample possibly containing the EBV antibody and an enzyme-labelled anti-human antibody is completed with a lift-off by integral hydrolysis of the remaining ester groups at the SAM. The cleavage of the ester is removing any non-specifically bound protein during a following stringent washing step. The substantial improvement of the detection limit of an electrochemical immunoassay against EBV using native recombinant antigens, their immobilization after local deprotection using a scanning electrochemical microscope

(SECM) and the local read-out using the generator-collector mode of SECM with redox cycling amplification demonstrates the successful application of the proposed lift-off procedure.

Bei Kontakt einer Sensoroberfläche mit komplexen biologischen Proben, die eine große Zahl unterschiedlicher Proteine enthalten, behindert die nicht-spezifische Adsorption von Probeninhaltsstoffen die hochsensitive Bestimmung des gewünschten Analyten. Um nun den Einfluss von unspezifischer Adsorption an auf Thiolmonoschichten basierenden Sensoroberflächen stark zurückzudrängen, wird ein chemischer Lift-Off-Prozess vorgeschlagen. Eine Sequenz aus lokaler Hydrolyse des Isooctyl-3-Mercaptopropionsäureesters, der kovalenten Bindung eines spezifischen Antigens gegen den Epstein-Barr-Virus, die Inkubation mit einem Serum, das möglicherweise anti-EBV-Antikörper enthält, gefolgt von der Inkubation mit einer Lösung, die einen enzymmarkierten anti-Mensch-Antikörper enthält, wird mit einem Lift-Off durch integrale Hydrolyse der verbleibenden Estergruppen an der selbstassemblierten Monoschicht abgeschlossen. Die Esterspaltung führt zu der Entfernung von jeglichem unspezifisch adsorbierten Protein im nachfolgenden stringenten Waschschr. Eine signifikante Verbesserung des Detektionslimits eines elektrochemischen Immunoassays gegen EBV, der auf nativen rekombinant hergestellten EBV-Antigenen, ihrer Immobilisierung nach lokaler Entschützung des SAM mittels elektrochemischer Rastermikroskopie (SECM) und der lokalen Detektion im Generator-Kollektor-Modus des SECM und Redoxcycling beruht, zeigt die vorteilhafte Anwendung des vorgeschlagenen Lift-Off-Prozesses.

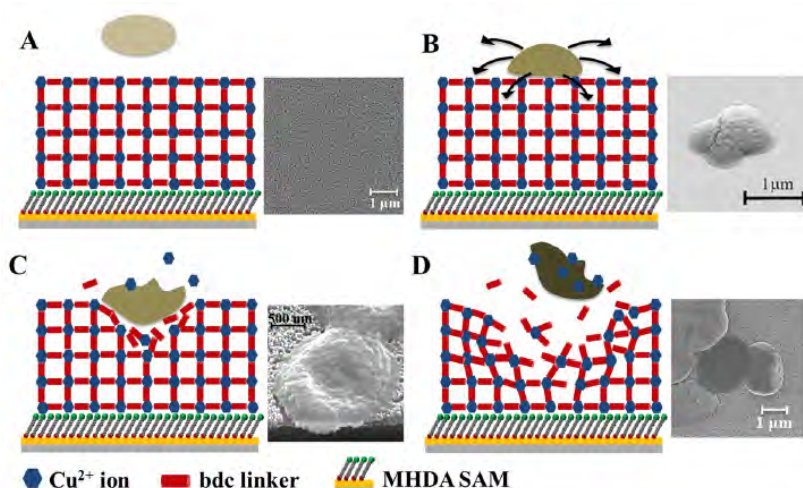
Axel Rosenhahn

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

Tel.: ++49-(0)234-3224200

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

M.P. Arpa-Sancet, M. Hanke, Z. Wang, S. Bauer, C. Azucena, H.K. Arslan, M. Heinle, H. Gliemann, C. Wöll, A. Rosenhahn, *Biointerfaces* **8** (2013) 29. Surface anchored metal-organic frameworks as stimulus responsive antifouling coatings



Surface-anchored, crystalline, and oriented metal organic frameworks (SURMOFs) have huge potential for biological applications due to their well-defined and highly-porous structure. A MOF-based, fully autonomous system combines sensing, a specific response, and the release of an antimicrobial agent. The Cu-containing SURMOF 2 is stable in artificial seawater and shows stimulus-responsive anti-fouling properties against marine bacteria. When *Cobetia marina* adheres on the SURMOF, the framework's response is lethal to the adhering microorganism. An in-depth analysis reveals that this response is induced by agents secreted from the microbes after adhesion to the substrate, and includes a release of Cu ions resulting from a degradation of the SURMOF. The stimulus-responsive antifouling effect of Cu-SURMOF 2 demonstrates the first application of Cu-SURMOF 2 as autonomous system with great potential for further microbiological and cell culture applications.

Oberflächengebundene, kristalline und hochorientierte metallorganische Gerüststrukturen (SURMOFs) haben aufgrund ihrer gut kontrollierbaren porösen Eigenschaften erhebliches Anwendungspotential in der Biologie. Als autonome Systeme können MOFs verwendet werden, um in Reaktion auf externe Stimuli antimikrobielle Substanzen auszuschütten. Der kupferbasierte SURMOF 2 ist stabil in künstlichem Meerwasser und reagiert auf die Adhäsion von Meeresbakterien mit einer biozidalen Antwort. Eine eingehende Analyse zeigt, dass Moleküle, welche von adhärenen Mikroben ausgesondert wurden den SURMOF zerstören und für die Bakterien giftige Kupferionen freisetzen. Der extern getriggerte antifouling Effekt ist die erste Anwendung von Cu-SURMOF 2 als autonomes, Biozid freisetzendes System mit großem Potential für mikrobiologische Anwendungen oder kontrollierte Wirkstofffreisetzung in der Biomedizin.

Dirk Wolters

Anal. Chem. – Biomolekulare Massenspektrometrie;

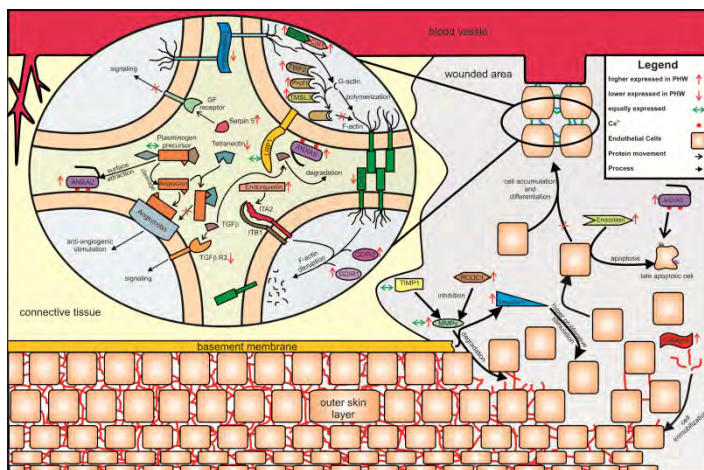
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

C. Krisp, F. Jacobsen, M.J. McKay, M.P. Molloy, L. Steinstraesser, D.A. Wolters, *Proteomics* (2013) **13** 2670-81. Proteome analysis reveals antiangiogenic environments in chronic wounds of diabetes mellitus type 2 patients

Im Gegensatz zu normal heilenden Wunden zeigen chronische Wunden häufig eine veränderte Proteinzusammensetzung, die den Wundheilungsprozeß besonders im Bereich Proliferation und Proteinabbau stören. Um hier weitere Untersuchungen durchzuführen, nutzen wir die MudPIT Technologie und wenden diese auf Wundflüssigkeiten an, die von Patienten stammen, die an dem diabetischen Fußsyndrom leiden. Insgesamt gelang es 186 differentiell regulierte Proteine nachzuweisen, die Regulationen insbesondere aus den interessanten Bereichen Entzündung, Angiogenese und Zellbeweglichkeit zeigen. Die chronischen Wundflüssigkeiten



zeigen erhöhte Konzentrationen an inflammatorischen S100 Markerproteinen. S100A8 und S100A9 waren ungefähr 10-fach höher abundant als in chronischen Wundflüssigkeiten, wobei S100A4, S100A7, S100A12 und S100P ebenfalls höhere Konzentrationen zeigen. Matrix-Metalloproteinasen (MMP), MMP1, MMP2 und MMP8 weisen ebenfalls erhöhte Werte in chronischen Wunden auf. Interessanterweise zeigen auch Kollagene und Proteine mit anti-angiogenen Eigenschaften erhöhte Kon-

zentrationen in chronischen Wunden, welches vermuten läßt, dass die Aktivität von MMPs erniedrigt ist. Diese Vermutung konnte durch Zymographie bestätigt werden. Für ausgewählte Proteine wurden die quantitativen Unterschiede zwischen den Wundtypen durch SRM Experimente bestätigt. Diese Ergebnisse tragen zu einem tieferen Verständnis der bislang noch nicht komplett verstandenen Mechanismen bei der Wundheilung bei.

In contrast to normal-healing acute wounds, chronic wounds commonly show disturbances in proteins that regulate the wound healing process, particularly those involved in cell proliferation and protein degradation. 186 proteins were identified as differentially regulated (>2-fold) and involved in biological processes including inflammation, angiogenesis and cell motility. The chronic wound fluids showed increased expression of the inflammatory response stimulating S100 proteins. S100A8 and S100A9 were approximately 10-fold higher in chronic wound fluid, while S100A4, S100A7, S100A12 and S100P were also elevated. Matrix metalloproteinases (MMP), MMP1, MMP2 and MMP8 were shown to be at higher levels in chronic wounds. Interestingly, collagens and proteins with anti-angiogenic properties were also found at higher levels in the chronic wounds, suggestive of MMP inactivation, which was confirmed by zymography. SRM was used to confirm the protein expression differences between wound types. This study contributes to our understanding of wound healing processes, demonstrating fundamental differences in protein expression regulating processes of inflammation, angiogenesis, and cell motility

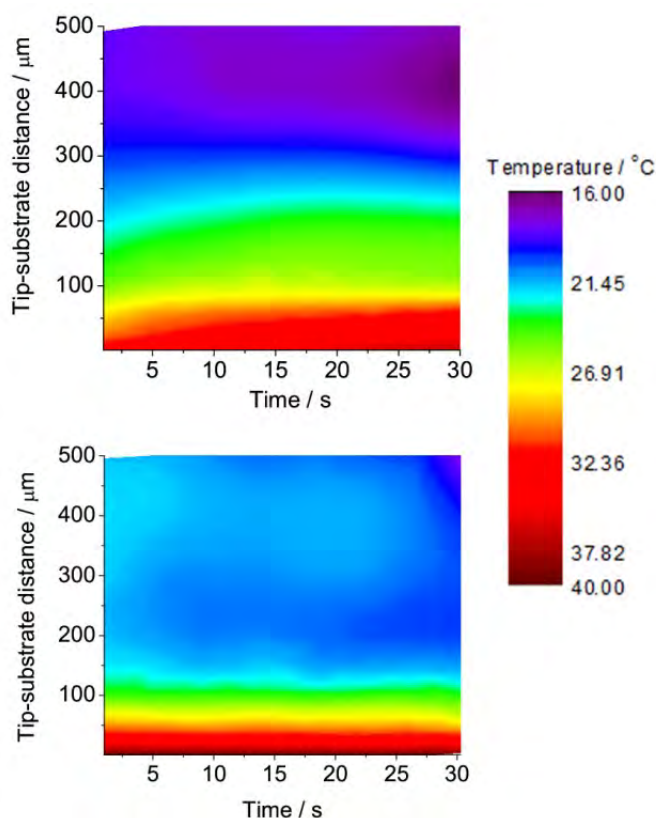
Nicolas Plumeré

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

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

email: nicolas.plumere@rub.de

A. Sode, M. Nebel, P. Pinyou, S. Schmaderer, J. Szeponik, N. Plumeré, W. Schuhmann, *Electroanalysis*, **25** (2013) 2084-2091. Determination of temperature gradients with micrometric resolution by local open circuit potential measurements at a scanning microelectrode.



We developed a method to determine localized temperature profiles using a scanning electrochemical microscopy setup and potentiometry. A Pt microelectrode was calibrated to correlate the open circuit potential (OCP) with temperature in an electrolyte containing ferri/ferrocyanide. Using the calibration graph, the temperature at a given position and a time could be derived. Following the OCP at the microelectrode temperature gradients above a heated surface were successfully probed and visualized with vertical micrometric resolution and with precision in temperature determination below 1°C . The spatial resolution is the highest reported to date for a temperature gradient extending into the solution from a solid surface.

Wir haben eine Methode zur lokalisierten Temperaturprofil Bestimmung mittels elektrochemisches Rastermikroskopie und Potentiometrie entwickelt. Das Potential einer Pt- Microelectrode in einem Elektrolyten mit ferri/ferrocyanid wurde zur Temperatur kalibriert. Mittels dieser Kalibrierung könnte die Temperatur in ausgewählte Punkte und Zeiten bestimmt werden. Durch Messung des Potentials an der Mikroelektrode positioniert über eine geheizte Oberfläche könnte das Temperaturprofil mit micrometrische Auflösung bestimmt werden.

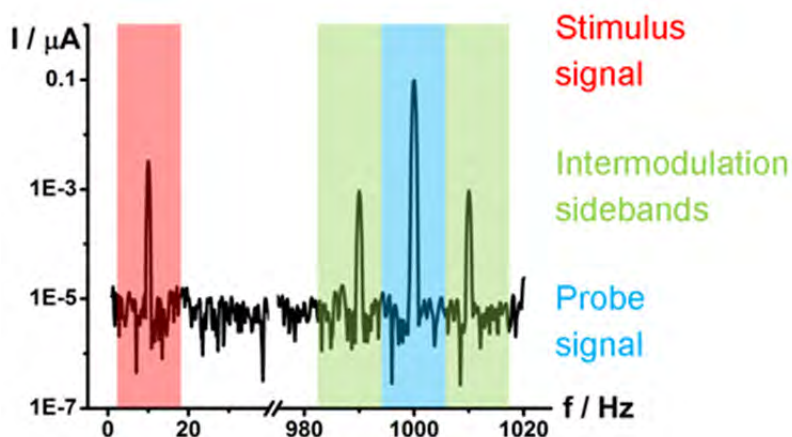
Fabio La Mantia

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

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

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

A. Battistel, F. La Mantia, *Anal. Chem.* **85** (2013) 6799-6805. Non-linear analysis: the intermodulated differential immittance spectroscopy



Intermodulation is used for the analysis of the non-linear behavior of electrochemical and electronic systems. As a matter of fact, differently than the passive elements, electrochemical systems have a highly non-linear character, which can be used to obtain information on the reaction mechanism and structure of the double layer. The setup for measuring and analyzing the intermodulated sidebands is discussed in detail, using a commercial Schottky diode as ideal system. A general intermodulated differential immittance spectroscopy technique is consequently defined as the analysis of the variation of the immittance elements as a function of the stimulus frequency, and its transfer function was called differential immittance spectrum. Through a simple model it was possible to precisely calculate the flat band voltage and the doping level of the Schottky diode from a single differential immittance spectrum. The differential immittance spectra of a dummy cell containing passive elements demonstrated the resolution limits of the technique.

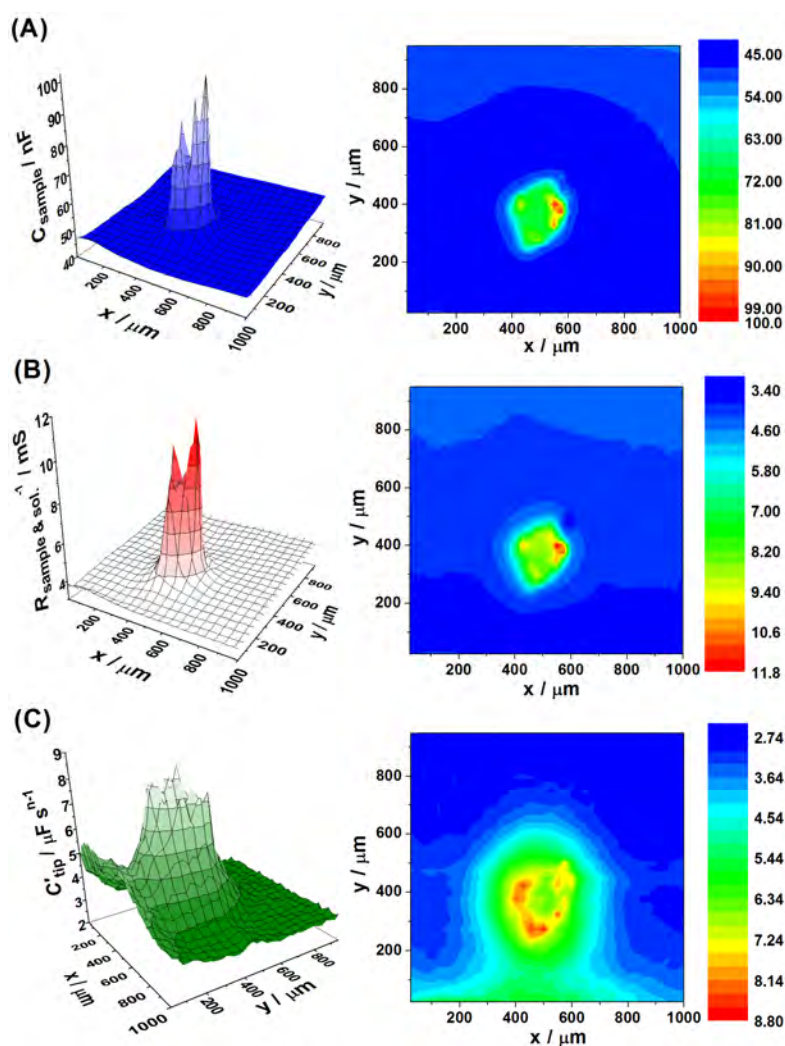
Aliaksandr Bandarenka

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

Tel.: ++49-(0)234-3229433;

email: aliaksandr.bandarenka@rub.de;

A.S. Bandarenka, K. Eckhard, A. Maljusch, W. Schuhmann. *Anal. Chem.* **85** (2013) 2443-2448. Localized Electrochemical Impedance Spectroscopy: Visualization of Spatial Distributions of the Key Parameters Describing Solid / Liquid Interfaces.



Acquisition of localized electrochemical impedance spectra as a function of spatial coordinates combined with novel approaches of data analysis brings a key for visualization of two-dimensional distributions of important parameters describing solid / liquid interfaces. They include the capacitance of the electric double layer, the resistance of the interfacial charge transfer, capacitances of adsorption, or other parameters depending on the properties of the system. Additionally, the proposed approach eliminates many common methodological problems of localized electrochemical impedance microscopies related to the frequency dependence of the actual pictures and difficulties with raw data interpretation. Thus, it offers a unique insight into the localized processes at the interface which is not possible to achieve using classical techniques. Figure

shows (A-B) spatial distributions of the key parameters describing solid / liquid interfaces: (A) the electric double layer capacitance and (B) the inverse of the charge transfer resistance; (C) also shows the contribution of the tip which is dependent on the position of the tip and which is separated by means of the spectra fitting procedures

Dominik Marx

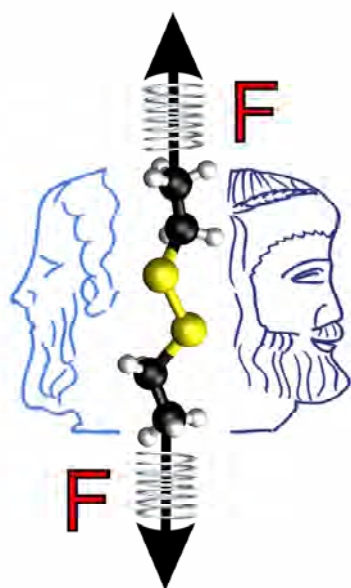
Lehrstuhl für Theoretische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

P. Dopieralski, J. Ribas-Arino, P. Anjukandi, M. Krupicka, J. Kiss, and D. Marx, *Nat. Chem.* **5** (2013) 685-691. The Janus-faced role of external forces in mechanochemical disulfide bond cleavage

AFM Messungen des mechanisch aktivierten Bindungsbruchs von Disulfidbrücken in Proteinen durch Hydroxidionen haben gezeigt, dass ab einer Kraft von etwa 0.5 nN die Beschleunigung der Reaktion aufgrund der Zugspannung deutlich reduziert wird. Dieser Reaktivitätsschalter wird basierend auf ab initio Simulationen auf die Janusrolle der mechanischen Kraft zurückgeführt, die zu antagonistischen Effekten führt. Auf der einen Seite wird Arbeit am System geleistet, was die Reaktion beschleunigt. Auf der anderen Seite induziert die Kraft eine konformationelle Deformation des S-S-C-C Diederwinkels, so dass die Disulfidbindung gegenüber dem Angriff durch OH⁻ aufgrund sterischer Hinderung abgeschirmt wird. Die Aufdeckung solcher kraftinduzierter konformationeller Änderungen, welche die chemische Reaktivität lenken, ist ein neuartiges Konzept in der Mechanochemie, das weit jenseits dieses Spezialfalls von Bedeutung ist.



AFM measurements on the mechanically activated protein disulfide bond cleavage by hydroxide ions have recently revealed that after a force of about 0.5 nN the acceleration of the reaction rate caused by the tensile load is substantially reduced. Based on ab initio simulations, this reactivity “switch” is herein traced back to a dual role played by the mechanical force leading to antagonistic effects. On one hand, the force performs work on the system, thereby accelerating the reaction. On the other hand, the force induces a conformational distortion involving the S-S-C-C dihedral angle that drives the disulfide to a conformation which is shielded against nucleophilic attack by OH⁻ due to steric hindrance effects. The discovery of force-induced conformational changes steering chemical reactivity provides a new key concept in mechanochemistry that is relevant much beyond the specific case.

Jörg Behler

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

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

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

N. Artrith, B. Hiller, J. Behler, *Phys. Status Solidi B* **250** (2013) 1191-1203. Neural Network Potentials for Metals and Oxides – First Applications to Copper Clusters at Zinc Oxide



Copper clusters supported at zinc oxide are used as industrial catalyst for the synthesis of methanol from CO and H₂. In order to study the elementary reaction steps in detail, reliable structural models of the catalyst are required. Consequently, many experimental studies have been carried out to characterize the properties of supported copper clusters, and a wealth of information has been obtained. Nevertheless, many atomistic details of the catalyst's structure are still unknown, which in principle could be revealed by theoretical investigations. Unfortunately, the systems observed in experiment are too complex to be addressed by established theoretical methods like density-functional theory. High-dimensional neural network potentials (NNPs) allow studying very large systems with an accuracy comparable to that of electronic structure methods. Building on previous work on copper and zinc oxide, we have now constructed a first high-dimensional NNP for the ternary

CuZnO system. Investigations of the interface between copper and zinc oxide show that a reliable description of the potential-energy surface can be obtained demonstrating that high-dimensional NNPs are a valuable new tool to study the structural properties of heterogeneous catalysts.

Zinkoxid-geträgerte Kupfercluster sind ein wichtiger industrieller Katalysator für die Methanolsynthese aus CO und H₂. Um die Elementarschritte dieser Reaktion im Detail untersuchen zu können, sind verlässliche Strukturmodelle des Katalysators erforderlich. Aus diesem Grund wurden in den letzten Jahren zahlreiche experimentelle Studien von geträgerten Kupferclustern durchgeführt, sodass viele neue Informationen gewonnen werden konnten. Trotz dieser Untersuchungen ist jedoch eine Vielzahl struktureller Details noch immer unbekannt, die im Prinzip durch theoretische Untersuchungen gewonnen werden könnten. Leider sind die im Experiment beobachteten Systeme jedoch zu komplex, um sie mit etablierten Methoden wie Dichtefunktionaltheorie Rechnungen untersuchen zu können. Hochdimensionale, mit Hilfe von Neuronalen Netzen (NN) entwickelte Potentiale ermöglichen eine Beschreibung sehr großer Systeme, wobei die erreichbare Genauigkeit vergleichbar zur Genauigkeit von Elektronenstrukturechnungen ist. Aufbauend auf früheren Arbeiten zu Kupfer und Zinkoxid haben wir nun ein erstes NN Potential für das ternäre CuZnO System entwickelt und für Kupfercluster auf Zinkoxid getestet. Erste Ergebnisse zeigen, dass auch die Atome an der Grenzfläche zwischen Kupfer und ZnO mit hoher Verlässlichkeit beschrieben werden können. NN Potentiale bieten daher eine neue wertvolle Methode, um realistische Katalysatormodelle zu untersuchen.

Christof Hättig

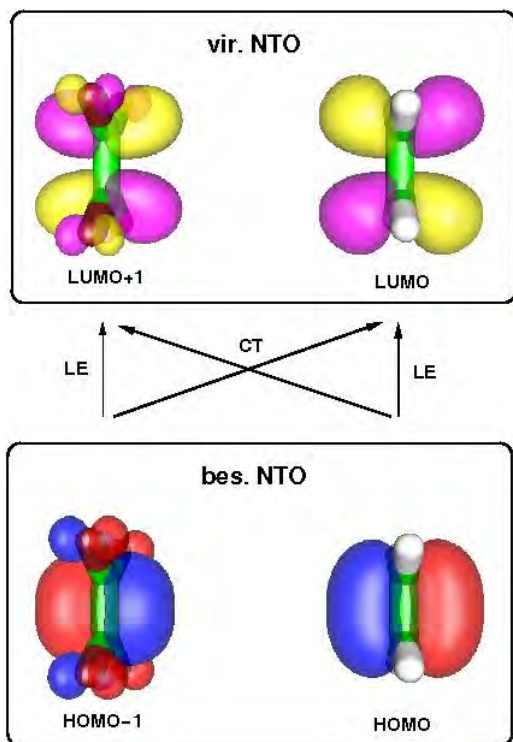
Theor. Chem. - Quantenchemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3228082; FAX: ++49-(0)234-3214065

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

B. Helmich, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **139** (2013) 084114. A pair natural orbital implementation of the coupled cluster model CC2 for excitation energies.

We demonstrate how to extend the pair natural orbital (PNO) methodology for excited states, presented in a previous work for the perturbative CIS(D) approximation, to iterative coupled cluster methods such as the approximate singles and doubles model CC2. The original $O(N^5)$



scaling of the PNO construction is reduced by using orbital-specific virtuals (OSVs) as an intermediate step without spoiling the accuracy of the PNO method. Furthermore, a slow convergence for charge-transfer states is resolved by a Laplace transformation. With state-specific truncated PNO expansions, the eigenvalue problem is solved by combining the Davidson algorithm with deflation and an automated generation of new PNOs to achieve self-consistency of the PNO space. For a large test set, we found that truncation errors for PNO-CC2 excitation energies are only slightly larger than for PNO-CIS(D). The efficiency of PNO-CC2 is demonstrated for a large organic dye, where a reduction of the doubles space by a factor of more than 1000 is obtained compared to the canonical calculation. A compression of the doubles space by a factor 30 is achieved by a unified OSV space. Moreover, calculations with the still preliminary PNO-CC2 implementation on a series of glycine oligomers revealed an early break even point with a canonical RI-CC2 imple-

mentation between 100 and 300 basis functions.

Wir zeigen, wie die paar-natürlichen Orbitale (PNO) für angeregte Zustände, die wir in einer vorangegangenen Arbeit für die störungstheoretische CIS(D)-Näherung eingeführt haben, auf iterative Coupled-Cluster-Methoden wie das approximierte Coupled-Cluster Singles-and-Doubles-Modell CC2 erweitert werden kann. The ursprüngliche $O(N^5)$ -Skalierung der PNO-Konstruktion wird durch orbital-spezifischen virtuelle Räume (OSVs) als Zwischenschritt reduziert ohne die Genauigkeit der PNO-Methode zu verringern. Desweiteren konnte die langsamere Konvergenz für Charge-Transfer-Zustände durch eine Laplace-Transformation behoben werden. Das Eigenwertproblem mit zustandsspezifischen PNO-Entwicklungen wird durch Kombination von Davidson-Algorithmus und Deflation und eine automatische Neuberechnung der PNOs gelöst, um eine Selbstkonsistenz der PNO-Räume zu erreichen. Mit einen großen Testsatz konnten wir zeigen, dass die Abschneidefehler für PNO-CC2 nur wenig größer als für PNO-CIS(D) sind. Die Effizienz von PNO-CC2 wird an einem großen organischen Farbstoff demonstriert, bei dem eine Reduktions der Doubles um einen Faktor von über 1000 im Vergleich zur kanonischen Rechnung erhalten wird. Eine Kompression der Doubles um einen Faktor 30 wird durch einen vereinigten OSV-Raum erhalten. Rechnungen an Glyzin-Oligomeren zeigen einen frühen Überschneidungspunkt mit einer kanonischen RI-CC2-Implementierung zwischen 100 und 300 Basisfunktionen.

Volker Staemmler

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

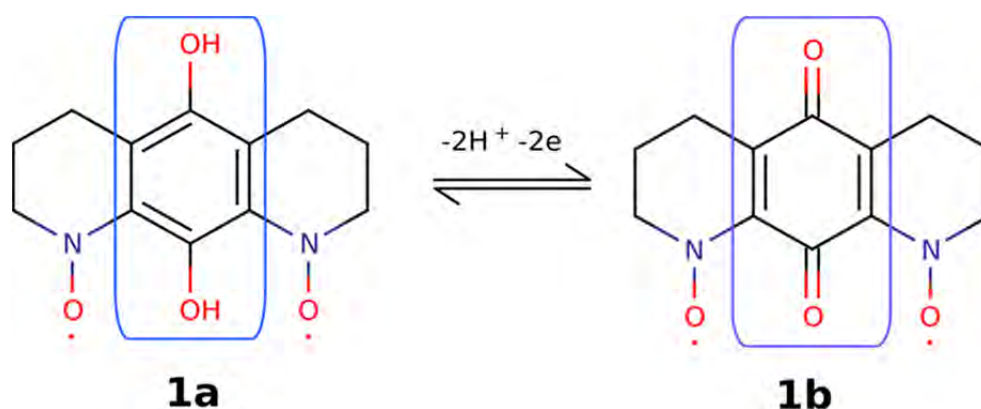
Tel.: ++49-(0)234-3226752; FAX: ++49-(0)234-3214045

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

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

Md. E. Ali, V. Staemmler, F. Illas, P. M. Oppeneer, *J. Chem. Theory Comput.*, 9 (2013) 5216-5220. Designing the redox-driven switching of ferro- to antiferromagnetic couplings in organic diradicals.

Die beiden ungepaarten Elektronen in einem organischen Diradikal können entweder ferromagnetisch zu einem Triplett-Zustand oder antiferromagnetisch zu einem Singulett gekoppelt werden. Für das unten abgebildete Diradikal ergeben unsere quantenchemischen Rechnungen – sowohl auf Dichtefunktional-Niveau als auch mit ab initio Methoden – eine ferromagnetische Kopplung der beiden Nitroxid-Radikalzentren, falls der „Koppler“ eine Hydrochinon-Einheit ist (Fig. 1a), und eine antiferromagnetische Kopplung im Falle eines Chinon-Kopplers (Fig. 1b). Es sollte also experimentell möglich sein, durch eine Redox-Reaktion einen Wechsel der magnetischen Kopplung – von ferro- zu antiferromagnetisch und umgekehrt – zu erreichen und damit in einer rein organischen Substanz einen „magnetischen Schalter“ zu erhalten.



The two unpaired electrons in an organic diradical can be coupled either ferromagnetically to a triplet state or antiferromagnetically to a singlet. Our quantum chemical calculations – both on density functional level as well as with ab initio methods – have shown that in the diradical depicted above the coupling of the two nitroxide radical centres is ferromagnetic if the “coupler” is a hydroquinone moiety (Fig. 1a) but antiferromagnetic in case of a quinone coupler (Fig. 1b). Therefore it should be possible experimentally to change by means of a redox-reaction from ferro- to antiferromagnetic coupling and vice versa. This opens up the possibility to construct “magnetic switches” in purely organic substances.

Robert Franke

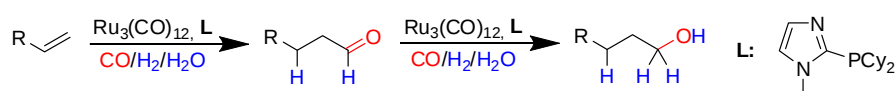
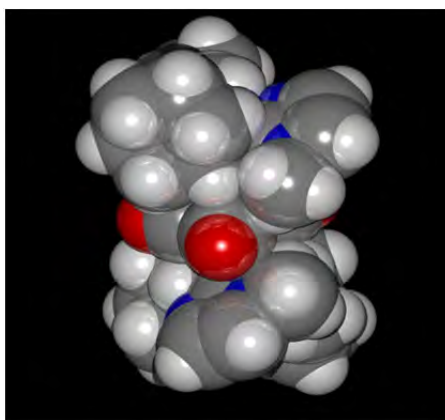
Evonik Industries AG, Paul-Baumann-Straße 1, D-45772 Marl

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

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

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

I. Fleischer, K. M. Dyballa, R. Jennerjahn, R. Jackstell, R. Franke, A. Spannenberg, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **52**, (2013), 2949-2953. From Olefins to Alcohols: Efficient and Regioselective Ruthenium-Catalyzed Domino Hydroformylation/Reduction Sequence



Carbonylierungen von Olefinen gehören zu den bedeutendsten industriell eingesetzten homogen katalysierten Umsetzungen. Gegenwärtig werden insbesondere niedere aliphatische Olefine im Millionen-Tonnen-Maßstab zu Aldehyden hydroformyliert und anschließend zu aliphatischen Alkoholen umgesetzt, die in Lösungsmitteln, Weichmachern und Spezialchemikalien verwendet werden. Sowohl in industriellen Anwendungen wie auch in der universitären Forschung werden im Wesentlichen Katalysatoren auf Rhodium-Basis eingesetzt, gefolgt von Cobalt-Systemen. Katalysatoren basierend auf anderen Metallen fanden in der Vergangenheit wenig Beachtung. Unter den für die Carbonylierung beschriebenen Edelmetallen ist das Ruthenium das preiswerteste. In dieser Arbeit wird ein aktives und selektives auf Ruthenium basierendes Katalysatorsystem beschrieben, welches terminale wie auch interne Alkene in einer Dominoreaktion zu Alkoholen umsetzt.

Carbonylation reactions of olefins belong to the most important industrially applied homogeneous catalytic transformations. Nowadays, especially, lower aliphatic olefins are converted on a million-ton scale via hydroformylation to aldehydes, and further on to aliphatic alcohols, which are applied as main components of solvents, plasticizers, specialties, etc. By far the most utilized catalysts for hydroformylation reactions both in industry and academia are based on rhodium, followed by cobalt. Other metal catalysts have not received much attention in the past. Among all the available noble metal catalysts for carbonylation reactions, ruthenium is the least expensive metal. This work describes an active and selective ruthenium-based catalyst system for the conversion of terminal and internal aliphatic and araliphatic alkenes to linear alcohols via a domino hydroformylation/reduction reaction sequence.

Lars Schäfer

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

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

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

T. A. Wassenaar, H. I. Ingolfsson, M. Prieß, S.J. Marrink, L. V. Schäfer, *J. Phys. Chem. B* **117** (2013) 3516-3530. Mixing Martini: Electrostatic Coupling in Hybrid Atomistic/Coarse-Grained Biomolecular Simulations



Hybrid all-atom/coarse-grained (AA/CG) models in which atomistic solutes (e.g., proteins) are embedded in a coarse-grained environment (e.g., water) can substantially increase computational efficiency of molecular dynamics (MD) simulations. However, interfacing both levels of resolution is a major challenge that requires a balanced description of all relevant interactions, i.e., AA/AA, CG/CG, and AA/CG. We developed and critically tested hybrid AA/CG schemes that combine different AA and CG force fields in such a way that electrostatic interactions between the two regimes are explicitly taken into account. This coupling is particularly important for polar solvents, such as water, that screen the electrostatic interactions. To enact electrostatic coupling, we used various recently developed polarizable CG water models. The hybrid AA/CG simulations are compared to the respective data from fully AA and fully CG simulations and from experiments. Our work high-

lights some of the key challenges — and suggests possible solutions — on the way toward hybrid AA/CG models that are both computationally efficient and at the same time sufficiently accurate to address biomolecular systems.

Hybride Multiskalen-Ansätze, die Simulationsmodelle mit atomistischer (all-atom, AA) und grobkörniger (coarse-grained, CG) Auflösung miteinander verbinden, können den Rechenaufwand von Molekulardynamik (MD) Simulationen erheblich verringern. Für biomolekulare Systeme ist eine mögliche Anwendung z.B., die Proteine auf atomistischem Niveau zu beschreiben, während für die Umgebung (hauptsächlich Wasser) ein effizientes CG Modell ausreicht. Eine Herausforderung ist hierbei die Nahtstelle zwischen beiden Auflösungs-niveaus, da diese eine ausgewogene Beschreibung aller Wechselwirkungen, d.h. AA-AA, CG-CG, und AA-CG erfordert. Wir entwickeln hybride AA/CG Methoden, die verschiedene AA und CG Kraftfelder so miteinander kombinieren, dass die wichtigen elektrostatischen Wechselwirkungen zwischen den beiden Auflösungs-niveaus explizit berücksichtigt werden. Diese Kopplung ist besonders in polaren Lösungsmitteln wie z.B. Wasser wichtig, da diese die elektrostatischen Wechselwirkungen modulieren. Um die elektrostatische Kopplung zu realisieren haben wir verschiedene polarisierbare grobkörnige Wassermodelle eingesetzt. MD Simulationen mit dem AA/CG Hybridmodell wurden direkt und quantitativ mit den entsprechenden Simulationen auf vollständig atomistischem Niveau sowie mit experimentellen Daten verglichen. Unsere Arbeiten heben einige der Schlüsselherausforderungen hervor — und zeigen mögliche Lösungswege auf — auf dem Weg zu AA/CG Hybridmodellen, die sowohl rechenzeiteffizient sowie gleichzeitig hinreichend genau sind, um biomolekulare Fragestellungen beantworten zu werden.

Werner Kutzelnigg

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

Tel.: ++49-(0)234-3228482; FAX: ++49-(0)234-3214045

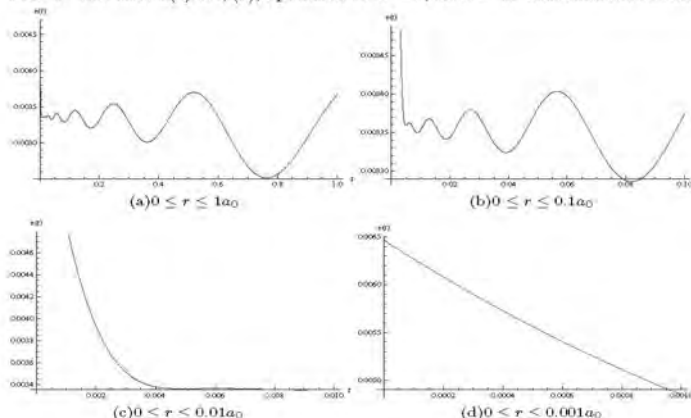
e-mail: Werner.Kutzelnigg@rub.de

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

W. Kutzelnigg, *Int. J. Quantum Chem.* **113** (2013) 203. Expansion of a wave function in a Gaussian basis. I. Local vs. global approximation

The expansion of the ground state wave function $\psi(r)$ of hydrogen-like ions in a Gaussian basis is derived from a discretization of a Gaussian integral transformation. This derivation involves an upper and a lower cut-off of the integration variable and the evaluation of the truncated integral by means of the trapezoid approximation, after a variable transformation to an exponentially decaying bell-shaped integrand. This automatically leads to an even tempered basis. Two criteria are studied, (a) the best approximation of $\psi(r)$ for $r = 0$, (b) the best approximation for the expectation value of the Hamiltonian. In either case the rate of convergence obeys a square-root exponential law with an error estimate $\sim \exp(-a\sqrt{n})$, if n is the basis size. The value of the constant a depends on the considered property and on the criterion for the optimization of the basis. Simple analytic expressions for the basis parameters α and β of an even-tempered Gaussian basis are derived. The comparison of the local and the global criteria gives some new and even unexpected insight.

FIG. 1: The error $e(r)$ of $\psi(r)$, optimized for $r = 0$, for $n = 10$ with different r -scales



Die Entwicklung der Wellenfunktion $\psi(r)$ des Grundzustands wasserstoff-ähnlicher Ionen in eine Gauss-basis wird hergeleitet aus einer Diskretisierung einer Gaussischen Integral-Transformation. Diese Herleitung basiert auf einem oberen und einem unteren Abschneide-Fehler für die Integrationsvariable sowie der Berechnung des abgeschnittenen Integrals mittels der Trapez-Regel, nach einer Variablentransformation zu einem exponentiell abklingenden glockenförmigen Integranden. Dies führt automatisch zu einer gleichmässig temperierten Basis. Zwei Kriterien werden untersucht, (a) die beste Approximation von $\psi(r)$ für $r = 0$, (b) die beste Approximation für den Erwartungswert des Hamiltonoperators. In beiden Fällen hat die Konvergenz-Rate ein Quadratwurzel-exponentielles Verhalten mit einer Fehlerabschätzung $\sim \exp(-a\sqrt{n})$, wenn n die Dimension der Basis ist. Der Wert der Konstante a hängt ab von der betrachteten Eigenschaft und vom Kriterium für die Basisoptimierung. Einfache analytische Ausdrücke für die Basis-Parameter α und β einer gleichmässig temperierten Gauss-basis werden herleitet. Der Vergleich der beiden Kriterien führt zu neuen, z.T. unerwarteten Einsichten.

Martin Muhler

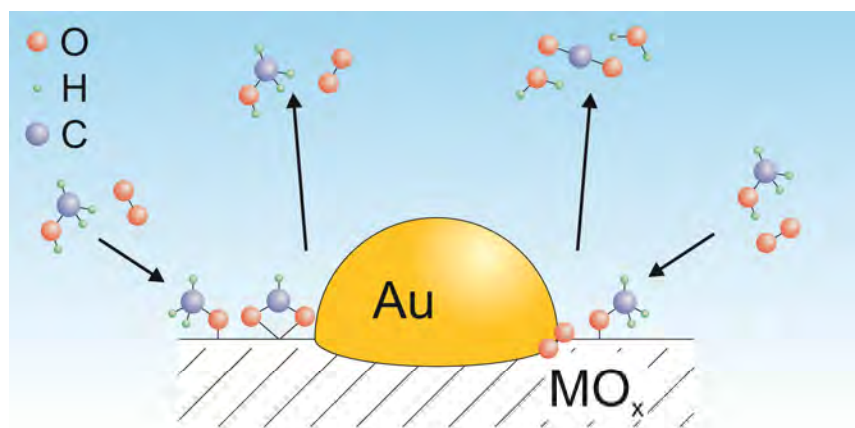
Lehrstuhl für Technische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

K. Kähler, M.C. Holz, M. Rohe, A.C. van Veen, M. Muhler, *J. Catal.* **299** (2013) 162-170.
Methanol oxidation as probe reaction for active sites in Au/ZnO and Au/TiO₂ catalysts

Methanol oxidation was used as test reaction to investigate the influence of the metal, of the support, and of metal-support interactions in Au/ZnO and Au/TiO₂ catalysts. Catalytic measurements as well as infrared spectroscopy were applied under continuous flow conditions in fixed-bed reactors. A strong effect of the Au loading ranging from 0.6 wt.% to 1.9 wt.% was found for both Au/ZnO and Au/TiO₂ catalysts with Au particle sizes in the range from 3 to 7 nm. Methanol combustion yielding H₂O and CO₂ was the main reaction path, but also reactions such as partial oxidation of methanol, steam reforming of methanol, methanol decomposition as well as the selective oxidation of methanol to methyl formate, formaldehyde, or dimethoxymethane were found to occur. Smaller Au particles and a higher amount of small Au particles had a beneficial effect on the activity. Infrared spectroscopy identified methoxy species adsorbed on the metal oxides as intermediates in methanol oxidation. The product distribution was found to depend on the oxide used as support due to the different Lewis acidities. On Au/TiO₂, strongly bound formates acted as reversible catalyst poison. The catalytic activity



was found to be correlated with the number of Au atoms at the perimeter of the Au nanoparticles. Correspondingly, oxygen activation is assumed to occur at their perimeter, and the oxide provides methoxy species reacting at the interface.

Zur Untersuchung des Einflusses des Metalls, des Trägers und von Metall-Träger-Wechselwirkungen bei Au/ZnO- und Au/TiO₂-Katalysatoren wurde die Methanoloxidation als Testreaktion eingesetzt. Die katalytischen sowie die Infrarot-spektroskopischen Messungen wurden im kontinuierlichen Flussbetrieb in Festbettreaktoren durchgeführt. Für beide Katalysatoren wurde ein starker Einfluss der Au-Beladung im Bereich von 0,6 Gew.-% bis 1,9 Gew.-% beobachtet. Der dominierende Reaktionsweg war die Totaloxidation von Methanol zu CO₂ und H₂O, wobei aber auch Reaktionen wie die partielle Oxidation, die Dampfreformierung, die Zersetzung sowie die selektive Oxidation von Methanol zu Methylformiat, Formaldehyd oder Dimethoxymethan erfolgten. Sowohl kleinere Au-Partikel als auch größere Mengen an Au-Partikeln zeigten einen positiven Einfluss auf die Aktivität. Mittels Infrarot-Spektroskopie wurden an dem Metalloxid adsorbierte Methoxyspezies als Intermediate der Methanoloxidation identifiziert. Die Produktverteilung hing von der Art des verwendeten Trägeroxides ab, was auf deren unterschiedliche Lewis-Acidität zurückgeführt werden konnte. Stark gebundene Formiate wirkten hier als reversible Katalysatorgifte auf dem Au/TiO₂. Darüberhinaus wurde beobachtet, dass die katalytische Aktivität mit der Anzahl der Au-Atome am Perimeter der Au-Nanopartikel korreliert. Daher kann vermutet werden, dass die Sauerstoffaktivierung am Perimeter erfolgt, während das Oxid die Methoxyspezies für die Reaktion an der Grenzfläche bereitstellt.

Prof. Dr. Wolfgang Grünert

Technische Chemie – Struktur/Aktivität heterogener Katalysatoren

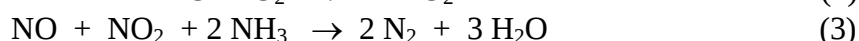
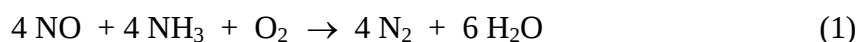
Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

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

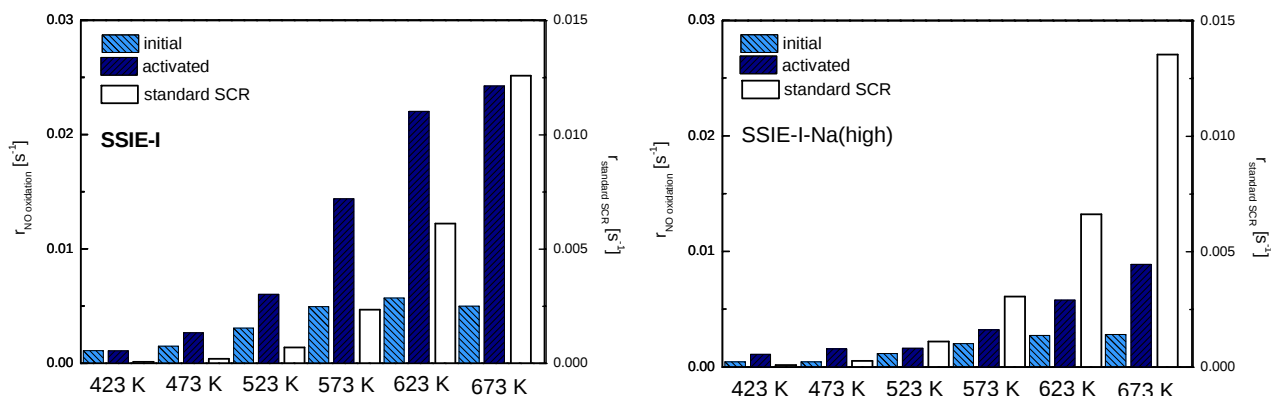
email: Wolfgang.Gruenert@techem.rub.de; <http://www.techem.rub.de/>

I. Ellmers, R. Pérez Vélez, U. Bentrup, A. Brückner, W. Grünert, *J. Catal.* **311** (2014), 199-211. Oxidation and Selective Reduction of NO over Fe-ZSM-5 – How related are these reactions?

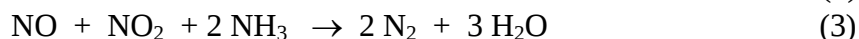
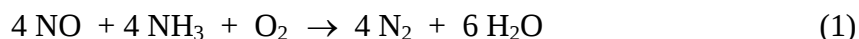
Die Standard-SCR (selektive katalytische Reduktion) von NO durch Ammoniak (1) ist stöchiometrisch die Summe aus NO-Oxidation (2) und schneller SCR (3).



In der Literatur herrschte die Meinung vor, dass auch der Mechanismus der Standard-SCR eine Sequenz aus (2) und (3) sei, mit (2) als geschwindigkeitsbestimmendem Schritt. In einer Serie kinetischer Messungen der NO-Oxidation und der Standard-SCR an sehr unterschiedlich präparierten Fe-ZSM-5-Katalysatoren konnten wir zeigen, dass die Geschwindigkeiten dieser Reaktionen in keinerlei Beziehung zueinander stehen. Insbesondere wurden Bedingungen gefunden, unter denen die NO₂-Bildung langsamer ist als die Standard-SCR – sie kann damit kein Teilschritt dieser Reaktion sein.



The standard SCR (selective catalytic reduction) of NO by ammonia (1) is stoichiometrically the sum of NO oxidation (2) and fast SCR (3).



In literature, the view that the mechanism of standard SCR consists of a sequence of (2) and (3) as well has been very much favored recently, and (2) has been considered rate limiting. By measuring reaction rates of NO oxidation and fast SCR over a wide range of Fe-ZSM-5 catalysts obtained via different routes, we show that the rates of these reactions are not related to each other in any way. In particular, there are cases where NO₂ formation is slower than standard SCR. It can therefore not be involved in the mechanism of this reaction.

Yuemin Wang

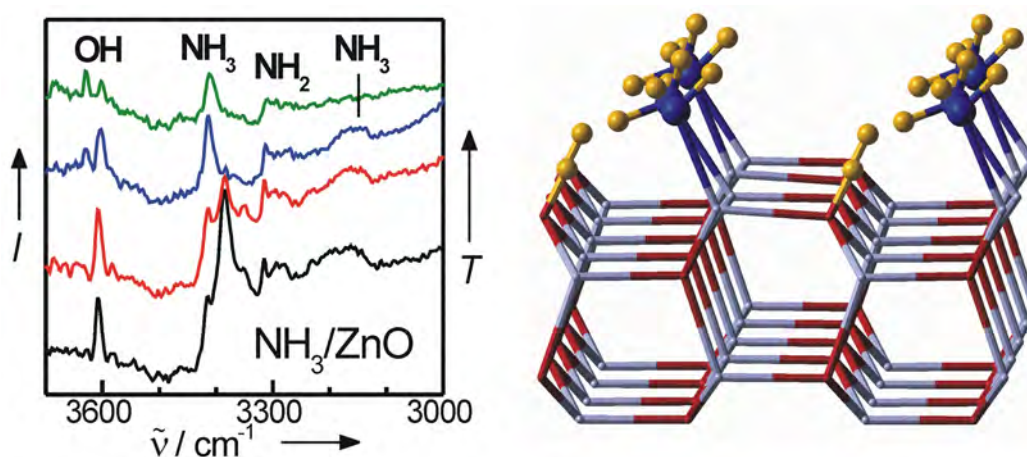
Tech. Chem./Phys. Chem. - Oberflächenchemie; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

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. Noei, F. Gallino, L. Jin, J. Zhao, C. Di Valentin, Y. Wang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 1977-1981. Coverage Induced Hydrogen Transfer on ZnO Surfaces: From Ideal to Real Systems.

Die Chemie von Ammoniak an Metall-Oxidoberflächen ist von besonderer Bedeutung, weil Ammoniak ein Prototyp-Molekül zur Untersuchung der Säure-Base-Eigenschaften von Oxidoberflächen ist. Hier wurde die Adsorption von NH_3 auf ZnO-Oberflächen (Einkristallen und Pulverpartikeln) mithilfe oberflächenempfindlicher Techniken (HREELS, UHV-FTIRS und TDS) in Kombination mit präzisen Dichtefunktionaltheorie(DFT)-Rechnungen untersucht. Während bei niedrigen Bedeckungen NH_3 intakt an Zn^{2+} -Kationen (Lewis-Säuren) adsorbiert, führt die NH_3 -Adsorption bei voller Monolage zu einer ungewöhnlichen partiellen Dissoziation auf der perfekten ZnO(10-10)-Oberfläche, wobei sich eine gemischte Adschicht von NH_3 -, NH_2 - und OH-Spezies in einer (2x1)-Überstruktur bildet. Der unerwartete Wasserstofftransfer zwischen adsorbiertem NH_3 und benachbartem O^{2-} -Anion (Lewis-Base) ist eine Folge des komplexen Zusammenspiels von mehreren Faktoren, einschließlich der H-Brückenbindung, der sterischen Abstoßung und dem pK_a -Wert.



The NH_3 chemistry on metal oxide surfaces is of particular importance because ammonia is a prototype molecule to investigate the acid-base properties of oxide surfaces. Here, the NH_3 adsorption on ZnO surfaces of both single crystals and powder particles was studied by surface-sensitive techniques (HREELS, UHV-FTIRS and TDS) in conjunction with accurate density functional theoretical (DFT) calculations. While at low coverage NH_3 prefers to adsorb at Zn^{2+} cations (Lewis acid sites) as an intact molecule, the adsorption of NH_3 at full monolayer leads to an unusual partial dissociation yielding a mixed adlayer of NH_3 , NH_2 and OH species in a (2x1) superstructure. The unexpected hydrogen transfer between adsorbed NH_3 and neighbouring O^{2-} base is a consequence of the complex interplay of multiple factors including H-bonding, steric repulsion and pK_a .

Jennifer Strunk

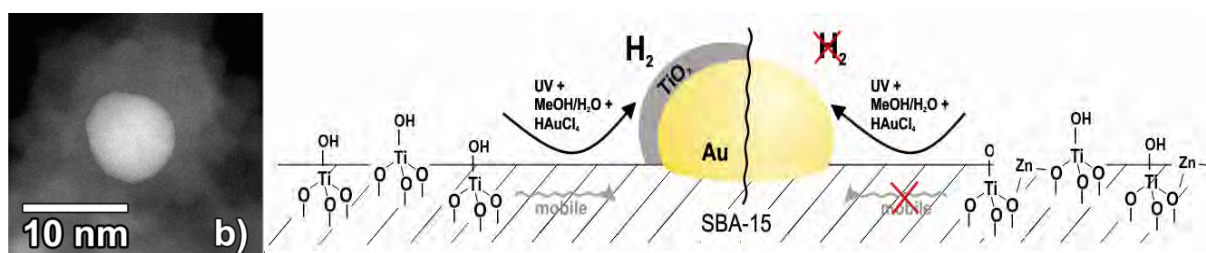
Lehrstuhl für Technische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

B. Mei, C. Wiktor, S. Turner, A. Pougin, G. van Tendeloo, R.A. Fischer, M. Muhler, J. Strunk, *ACS Catal.* **3** (2013) 3041-3049. Evidence for metal-support interactions in Au modified $\text{TiO}_x/\text{SBA-15}$ materials prepared by photodeposition

Gold nanoparticles have been efficiently photo-deposited onto titanate-loaded SBA-15 ($\text{Ti}(x)/\text{SBA-15}$) with different titania coordination. Transmission electron microscopy shows that relatively large gold nanoparticles are photo-deposited on the outer surface of the $\text{Ti}(x)/\text{SBA-15}$ materials. TiO_x tends to form agglomerates in close proximity to the gold nanoparticles, often forming core-shell Au/TiO_x structures. This behavior resembles typical processes observed due to strong-metal support interactions. In the presence of gold, the formation of hydrogen on $\text{Ti}(x)/\text{SBA-15}$ during the photo-deposition process is greatly enhanced. When isolated zinc oxide (ZnO_x) species are present on $\text{TiO}_x/\text{SBA-15}$, gold nanoparticles are smaller and well dispersed within the pores. Agglomeration of TiO_x -species and the formation of Au/TiO_x structures is negligible in this case. The dispersion of gold and the formation of Au/TiO_x in the SBA-15 matrix seem to depend on the mobility of the TiO_x species. The mobility is determined by the initial degree of agglomeration of TiO_x and the presence of Ti-O-Si vs. Ti-O-Zn bonds.



Goldnanopartikel wurden erfolgreich photoabgeschieden auf titanatbeladenem SBA-15 ($\text{Ti}(x)/\text{SBA-15}$) mit unterschiedlicher Koordination des Titans. Transmissionselektronenmikroskopie belegt, dass recht große Goldnanopartikel auf der äußeren Oberfläche von $\text{Ti}(x)/\text{SBA-15}$ photoabgeschieden werden. TiO_x neigt zur Bildung von Agglomeraten in der Nähe der Goldnanopartikel, so dass oft Kern-Schale- Au/TiO_x -Strukturen ausgebildet werden. Dieses Verhalten ähnelt typischen Prozessen, die durch starke Metall-Träger Wechselwirkungen hervorgerufen werden. Die Anwesenheit von Gold verbessert deutlich die Wasserstoffbildung auf $\text{Ti}(x)/\text{SBA-15}$ während der Photoabscheidung. Wenn isolierte Zinkoxidspezies (ZnO_x) auf $\text{TiO}_x/\text{SBA-15}$ vorliegen, dann sind die Goldnanopartikel kleiner und liegen wohl-dispergiert in den Poren vor. Agglomeration der TiO_x -Spezies und die Bildung von Au/TiO_x -Strukturen ist in diesem Fall vernachlässigbar. Die Dispersion von Gold und die Bildung von Au/TiO_x -Strukturen in der SBA-15-Matrix scheinen abhängig zu sein von der Mobilität der TiO_x -Spezies. Die Mobilität hängt ab von dem anfänglichen Agglomerationsgrad von TiO_x , und der Anwesenheit von Ti-O-Si oder Ti-O-Zn-Bindungen.

Michael Hollmann

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

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

Email: michael.hollmann@rub.de

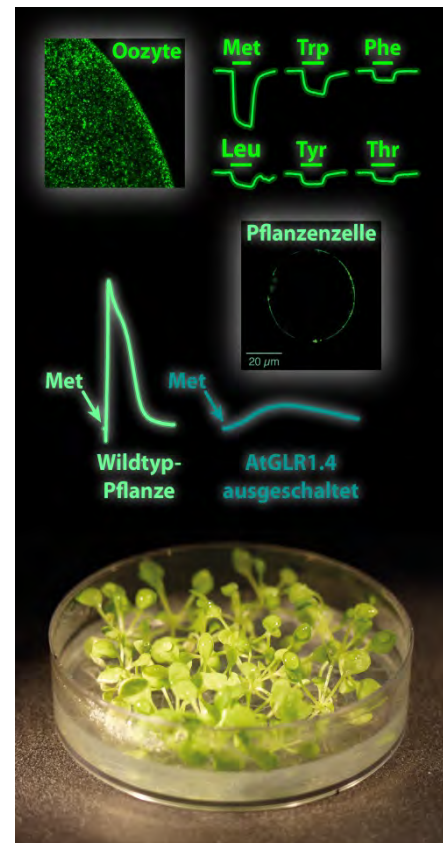
Website: <http://www.ruhr-uni-bochum.de/bc1>

D. Tapken, U. Anschütz, L.-H. Liu, T. Huelsken, G. Seeböhm, D. Becker, M. Hollmann, *Science Signaling* **6**(279): ra47 (2013). A putative plant glutamate receptor emerges as an ion channel gated by multiple hydrophobic amino acids.

RUB-Pressemitteilung: <http://aktuell.ruhr-uni-bochum.de/pm2013/pm00191.html.de>
F1000 Plant Biology

The sequencing of the first plant genome in the 1990s led to the unexpected discovery of 20 (!) genes in *Arabidopsis thaliana* that are homologous to the 18 ionotropic glutamate receptor genes found in mammals. Those genes were named “glutamate-like receptors” (GLRs). In this study we showed for the first time true ion channel function in a heterologous system for one of the proteins encoded by these genes, AtGLR1.4, and we were able to clarify the nature of the ligand. The surprising result was that none of the known glutamatergic agonists activates the receptor; however, the amino acid methionine as well as six additional, mainly hydrophobic amino acids induce ionic currents and thus act as agonists. Nine other amino acids act as antagonists, while the remaining four amino acids glutamate, aspartate, glycine, and proline neither activate nor inhibit the receptor. The physiological relevance of the methionine response was demonstrated via two AtGLR1.4 knockout mutants that, as expected, lacked the methionine response of wild type seedlings.

Die Sequenzierung des ersten Pflanzengenoms in den 90er Jahren erbrachte den völlig unerwarteten Befund, dass *Arabidopsis thaliana* 20 (!) Gene besitzt, die zu den 18 Genen ionotroper Säuger-Glutamatrezeptoren homolog sind. Wegen dieser Ähnlichkeit wurden sie als „glutamatrezeptorähnliche Rezeptoren“ (GLRs) bezeichnet. Für das Proteinprodukt eines dieser Gene, AtGLR1.4, konnten wir nun zum ersten Mal echte Ionenkanalfunktion in einem heterologen Expressions-system direkt nachweisen und die Natur des Liganden aufklären. Das überraschende Ergebnis war, dass keiner der bislang vermuteten glutamatergen Agonisten den Rezeptor aktiviert, sondern die Aminosäure Methionin sowie sechs weitere, überwiegend hydrophobe Aminosäuren. Darüber hinaus wirken neun weitere Aminosäuren als Antagonisten, während die vier Aminosäuren Glutamat, Aspartat, Glycin und Prolin den Rezeptor weder aktivieren noch inhibieren. Die physiologische Relevanz der Methioninantwort konnten wir darüber hinaus durch zwei AtGLR1.4-Knockout-Mutanten nachweisen, deren Setzlinge im Gegensatz zum Wildtyp wie erwartet nicht mehr auf Methionin reagierten.



Expression of the glutamate-like receptor AtGLR1.4 from *Arabidopsis* (green) in a frog oocyte. The amino acids Met, Trp, Phe, Leu, Tyr, and Thr trigger inward currents. When methionine is added, an electrical signal is observed in the plant. When AtGLR1.4 is knocked out, the Met-induced signal disappears.

Rolf Heumann

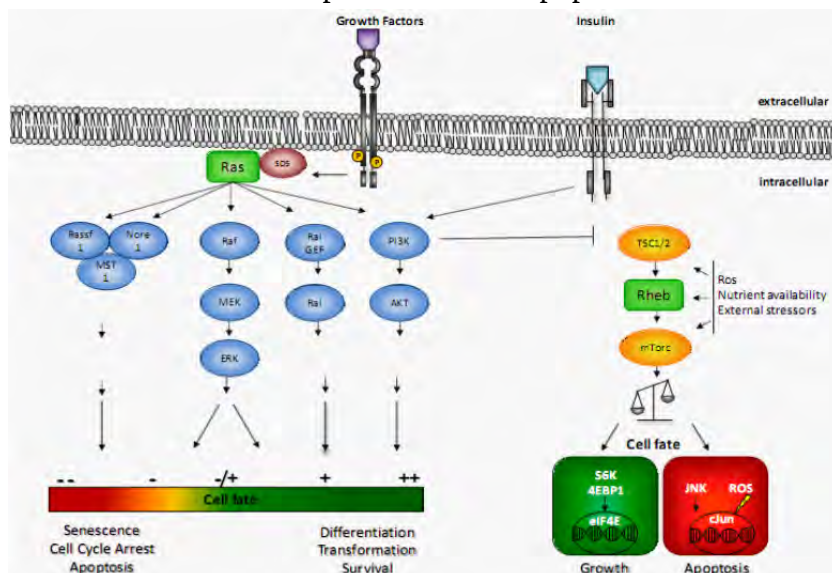
Biochemie II - Molekulare Neurobiochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

A. Ehrkamp, C. Herrmann, R.I. Stoll, R. Heumann, R., *Cancers* **5** (2013) 639-661. Ras and Rheb Signaling in Survival and Cell Death.

One of the most obvious hallmarks of cancer is uncontrolled proliferation of cells partly due to independence of growth factor supply. A major component of mitogenic signaling is **Ras** (**rat sarcoma**), a small GTPase. It was the first identified human protooncogene and is known since more than three decades to promote cellular proliferation and growth. Ras was previously shown to support growth factor-independent survival during development and to protect from chemical or mechanical lesion-induced neuronal degeneration in postmitotic neurons. In contrast, for specific patho-physiological cases and cellular systems it has been shown that Ras may also promote cell death. It seems likely that the outcome of Ras signaling depends on the balance between the activation of its various downstream effectors, thus determining cellular fate towards either proliferation or apoptosis.



Ras homologue enriched in brain (**Rheb**) is a protein from the Ras superfamily that is also known to promote proliferation, growth, and regeneration through the mammalian target of rapamycin (mTor) pathway. However, recent evidences indicate that the Rheb-mTor pathway may switch its function from a pro-growth into a cell death pathway, depending on the cellular situation.

Eine der kennzeichnenden Merkmale der Krebsentstehung ist die entartete Zellteilung. Diese kann durch Abkopplung aus der Kontrolle durch Wachstumsfaktoren verursacht werden. Ein evolutionär konservierter Signalweg wird durch das an der inneren Zellmembran verankerte Proto-Onkogen **Ras** (**rat sarcoma**) reguliert. Wir konnten vormals zeigen, dass Ras ein Nervenwachstumsfaktor-unabhängiges (autonomes) Überleben von Nervenzellen ermöglicht. Darüber hinaus verhinderte Aktivierung von Ras im erwachsenen Gehirn die neuronale Degeneration nach neurotoxischer Behandlung im Parkinson Modell oder nach mechanischer Durchtrennung des Nervs. Dennoch wurde von pathophysiologischen Fällen berichtet, dass Ras einen verstärkten Zelltod verursachen kann. Dies ist durch eine zellspezifisch unterschiedliche Expression von Proteinen erklärbar, die nach Interaktion mit Ras entweder Zellteilung oder andererseits auch die Apoptose (Zelltod) bewirken können.

Das Ras-Homologe Protein im Gehirn, **Rheb** (**Ras homologue enriched in brain**) stimuliert Wachstum und Regeneration von Nervenfortsätzen durch eine Phosphat-übertragende *mammalian target of rapamycin* (mTor) Kinase. Wir zeigen, dass der Rheb/ mTor Signalweg von einem Wachstum-fördernden in einen Apoptose-fördernden Signalweg umschaltet, wenn Zellen von einem gesunden in einen gestressten Zustand übergeführt werden.

Irmgard Dietzel-Meyer

Biochemie II– AG Elektrobiophysik neuronaler Zellen

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum;

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

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

P. Happel, K. Möller, N.K. Schwering, I.D. Dietzel, *Sci. Rep.* **3** (2013) 1806. Migrating oligodendrocyte progenitor cells swell prior to soma dislocation. doi:10.1038/srep01806

Cell migration is essential for organogenesis, wound healing and target finding of immune cells. Tumor cells that escaped their environmental proliferation control turn into metastatic cells if they gain the ability to migrate. Among properties of the cytoskeleton to attach to extracellular matrix molecules, water and ion fluxes through various ion channels have been suggested to be essential for cellular dislocation. However, a direct demonstration, that water-flux induced cell swelling can be observed during cellular migration has so far been lacking. Using Scanning Ion Conductance Microscopy we have now succeeded to quantitatively demonstrate that the frontal parts of migrating oligodendrocytes swell prior to acceleration of the soma translocation. This suggests that the saltatory movement of the cell nucleus, known to occur during migration of several types of cells is generated by ion and water fluxes.

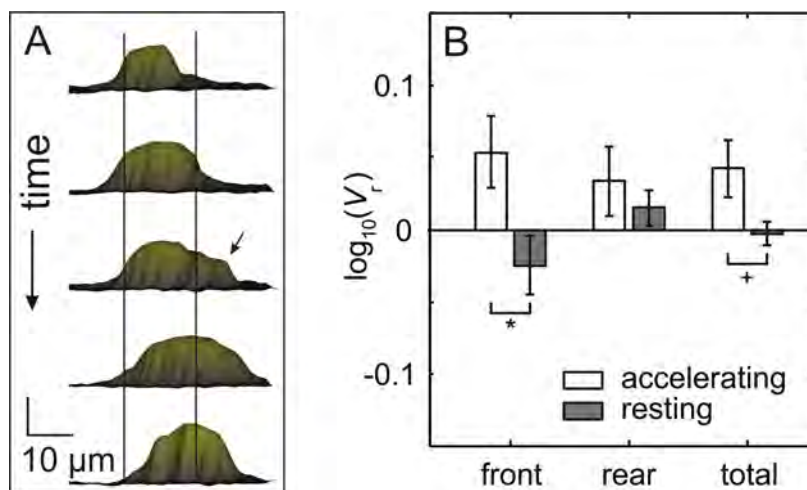


Figure 1: Volume changes during migration of an oligodendrocyte precursor cell (OPC). (A) height profile of an OPC (a glial cell from rat brain) traced with Scanning Ion Conductance Microscopy at five time points (ca. 20 minutes per scan). Arrow indicates the frontal cell swelling preceding acceleration of the nucleus. (B) Comparison of averaged frontal, rear and total cell

swelling of accelerating and resting cells using data from three successive scans. Whereas cells accelerating between scans 2 and 3 showed significant increases in frontal cell volumes between the preceding scans 1 and 2 this effect was not observed in resting cells.

Die Zellmigration spielt in der Organentwicklung, der Wundheilung und der Bewegung von Immunzellen zu ihrem Zielgewebe eine essentielle Rolle. Sich unkontrolliert entwickelnde Tumorzellen entwickeln Metastasen, wenn sie die Fähigkeit zur Migration erlangen. Neben den Eigenschaften der Zytoskelettproteine, an extrazelluläre Matrixmoleküle zu binden, wurde in den letzten Jahren diskutiert, dass Wasser – und Ionenflüsse durch diverse Ionenkanäle eine essenzielle Rolle bei der Zellmigration spielen könnten. Allerdings fehlte ein direkter Nachweis, dass Wasserfluss induzierte Zellschwellungen tatsächlich bei der Migration auftreten. Mit Hilfe der Ionenleitfähigkeits-Rastermikroskopie (SICM) ist es uns nun gelungen, quantitativ nachzuweisen, dass die Vorderseiten migrierender Oligodendrozyten vor der beschleunigten Zellbewegung anschwellen. Dies bedeutet, dass die saltatorische Bewegung des Zellkerns, die bei vielen Zelltypen während der Migration beobachtet werden kann, auf sukzessiven Wasser- und Ionenflüssen beruhen könnte.

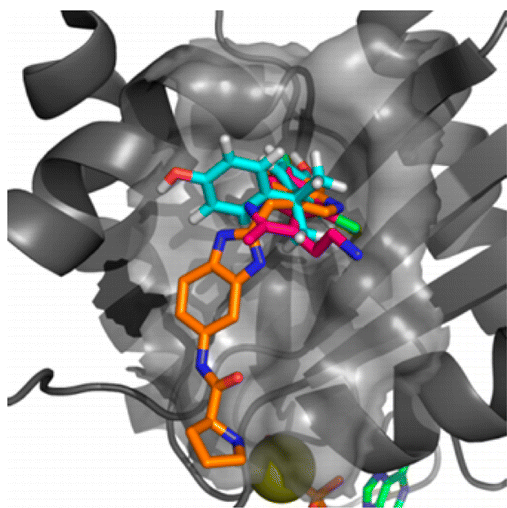
Raphael Stoll

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

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

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

M. Schöpel, K. F. G. Jockers, P. M. Düppe, J. Autzen, V. N. Potheraveedu, S. Ince, K. T. Yip, R. Heumann, C. Herrmann, J. Scherkenbeck, R. Stoll, *J. Med. Chem.* **56** (2013) 9664–9672. Bisphenol A Binds to Ras Proteins and Competes with Guanine Nucleotide Exchange: Implications for GTPase-Selective Antagonists



We show for the first time that bisphenol A has the capacity to interact directly with K-Ras and that Rheb weakly binds to bisphenol A and 4,4'-biphenol derivatives. We have characterised these interactions at atomic resolution suggesting that these compounds sterically interfere with the Sos-mediated nucleotide exchange in H- and K-Ras. We show that 4,4'-biphenol selectively inhibits Rheb signalling and induces cell death suggesting that this compound might be a novel candidate for treatment of tuberous sclerosis-mediated tumour growth. Our results propose a new mode of action for bisphenol A that advocates a reduced exposure to this compound in our environment. Our data may lay the foundation

for the future design of GTPase-selective antagonists with higher affinity to benefit of the treatment of cancer because K-Ras inhibition is regarded to be a promising strategy with a potential therapeutic window for targeting Sos in Ras-driven tumours.

Bisphenol A stört die Funktion von Proteinen, die entscheidend für Wachstumsprozesse in Zellen sind. Die Substanz, kurz BPA, kommt in vielen Kunststoffprodukten vor und steht im Verdacht, gesundheitsschädlich zu sein. Bisher ging man davon aus, dass Bisphenol A an Hormonrezeptoren bindet und dadurch seine schädliche Wirkung entfaltet. Es konnte nun gezeigt werden, dass die Substanz auch auf die sogenannten kleinen GTPasen wirkt. Kleine GTPasen sind Enzyme, die in zwei Zuständen in der Zelle vorliegen können. In der aktiven Form ist das Molekül GTP gebunden, in der inaktiven Form die energieärmere Form von GTP, GDP genannt. Diese Schalterproteine sind entscheidend dafür, Signale in der Zelle weiterzuleiten. Es stellte sich heraus, dass Bisphenol A an zwei verschiedene kleine GTPasen bindet, K-Ras und H-Ras, und den Austausch von GDP gegen GTP stört. Diese Studie liefert somit weitere Hinweise darauf, dass die physiologischen Wirkungen des Bisphenol A offenbar noch komplexer sein können als bisher gedacht. Die Deutsche Krebshilfe e. V. hat das Projekt seit 2011 gefördert. Verschiedene Einrichtungen haben zudem hervorgehoben, dass Bisphenol A gesundheitsschädlich sein könnte: das Bundesinstitut für Risikoforschung, die europäische Behörde für Lebensmittelsicherheit, „US Food and Drug Administration“ (FDA), „US National Institutes of Health“ (NIH) und die amerikanische Brustkrebsstiftung. Endgültig haben diese Institutionen das Gefährdungspotenzial jedoch noch nicht beurteilt. 2011 hat allerdings die Europäische Kommission Bisphenol A bei der Herstellung von Babyfläschchen verboten. Wissenschaftliche Studien weisen darauf hin, dass der Stoff Herz-Kreislauf-erkrankungen, Brust- und Prostatakrebs sowie neuronale Erkrankungen fördern könnte. Weitere im Rahmen dieser Studie gefundene verwandte Verbindungen zeigen aber auch Wege zu einer zukünftigen Entwicklung pharmazeutisch-wirksamer Substanzen gegen GTPase-vermittelte Tumore auf.

Katrin Sommer

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

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

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

K. Sommer, A. Russek, H. Kleinhorst, A. Kakoschke, N. Efig (Hrsg.), *Chemkon* **20** (2013) 5, 209-352. KEMIE – Kinder erleben mit ihren Eltern Chemie.

Children work their way through experiments and parents are welcome guests as soon as the children present their findings. Parents can also be convinced to spend a single day in the lab with their children. BUT: Can children and their parents also be motivated to return to the lab over an extended period of time? Parents and their children delivered a proof of principle right from the start of the project “KEMIE – Kids experience chemistry with their parents”. It took off with 96 pairs in October 2008. 75% of parents and children had taken part on seven or more occasions at the end of the first year. In October 2013, KEMIE celebrates its sixth birthday and 96 new pairs join in on the occasion.

Scientific methods and ways of thinking are at the heart of the KEMIE curriculum and its chemistry experience. They stretch from observation and measurement to controlling variables and testing hypotheses. Chemical methods are introduced through a curriculum following an upward spiral of complexity. This way, they serve as a guiding structure. Examples are taken from everyday appliances. Self-heating cans and bath salts become objects to be investigated. KEMIE has now been evaluated several times. This special issue finally presents in a unified manner the concept of KEMIE together with a detailed guide and the worksheets – sponsored by the German Chemical Industry Association Fund. The publication also offers insights into the empirical research on learning effects on children and parents through KEMIE.



Eltern sind willkommene Gäste bei der Präsentation von Ergebnissen, welche ihre Kinder erarbeitet haben. Eltern lassen sich auch gewinnen, einen Tag gemeinsam mit ihren Kindern zu experimentieren. Aber: Können Kinder und ihre Eltern auch über einen längeren Zeitraum mobilisiert werden? Bereits die Anmeldezahlen für die Premiere haben unsere Vorstellungen übertroffen, und so begann das Projekt „KEMIE – Kinder Erleben Mit Ihren Eltern Chemie“ im Oktober 2008 mit 96 Eltern-Kind-Paaren. Die Bilanz ein dreiviertel Jahr später: 75 % der Eltern-Kind-Paare nehmen sieben und mehr Termine wahr. Im Oktober 2013 begeht KEMIE seinen sechsten Geburtstag und startet erneut mit 96 Eltern-Kind-Paaren.

Das didaktische Konzept stellt für die Begegnung mit der Chemie die naturwissenschaftlichen Denk- und Arbeitsweisen in den Mittelpunkt. Die Bandbreite reicht von der Beobachtung und Messung über die Variablenkontrolle bis zum Umgang mit Hypothesen. Die Fachmethoden, an denen die Auseinandersetzung erfolgt, sind spiralcurricular angeordnet und bieten eine entsprechende Organisationsstruktur. Die Beispiele entstammen dem Alltag, sodass eine selbsterhitzende Kakaodose ebenso wie Badesalz zum Untersuchungsgegenstand wird. Die Konzeption des mehrfach erprobten Projektes KEMIE und die detaillierte Umsetzung incl. der einsatzfähigen Arbeitsblätter können – dank der finanziellen Unterstützung durch den Fonds der Chemischen Industrie – in diesem Sonderheft in einer bislang einmaligen Geschlossenheit präsentiert werden. Abgerundet wird die Darstellung durch einen Einblick in die empirische Begleituntersuchung bezüglich der Wirksamkeit der Projektteilnahme auf die Kinder bzw. ihre Eltern.



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



TRANSPOL ist ein im Dezember 2011 gestartetes interdisziplinäres Netzwerk, Initial Training Network (ITN), das junger Wissenschaftler im europäischen Bildungsbereich ausbildet. Thematisch ist TRANSPOL-ITN zwischen Zell- bzw. Molekularbiologie und Membranphysik angesiedelt. Spezielles Ziel ist es, ein molekulares Verständnis des Zusammenhangs zwischen intrazellulären Transportmechanismen und zellulärer Signalweiterleitung zu erwerben und deren mögliche Relevanz für das Verständnis menschlicher Krankheiten zu erkennen. Ein vollständiges Verständnis der komplexen Vorgänge der Endozytose, des intrazellulären Transports und der Signalweiterleitung, die an der Schnittstelle zwischen Membran und Zytoplasma stattfinden, impliziert die Erforschung von mechanischen und dynamischen Aspekten mittels membranphysikalischer Methoden. Somit erfordert dieses Vorgehen die kombinierte Expertise aus den Bereichen der Zell- bzw. Molekularbiologie und der Physik. TRANSPOL verbindet genau diese Gebiete des Fachwissens in einem gemeinsamen Ausbildungsprogramm. Dabei werden Spezialisten aus dem akademischen Bereich und der Privatwirtschaft gleichberechtigt zusammengeführt.

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

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

4G-PHOTOCAT

Fourth generation photocatalysts: nano-engineered composites for water decontamination in low-cost paintable photoreactors

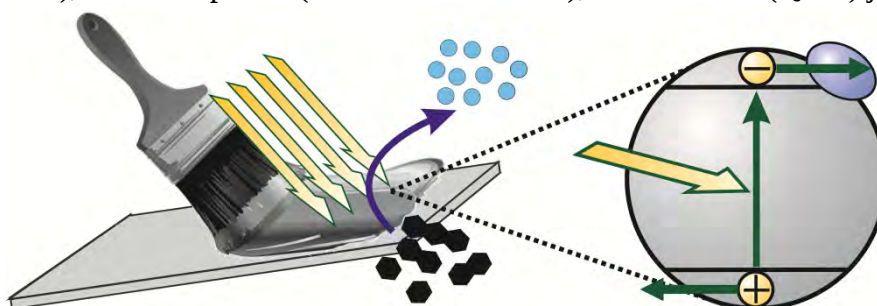
EU-funded collaborative project (7th Framework Programme, 2013-2017)

Webpage: <http://www.4g-photocat.eu>

Project Coordinator: Jun.-Prof. Dr. Radim Beránek; Email: radim.beranek@rub.de

Photocatalysis is potentially one of the cheapest and most efficient methods for purifying water from pollutants. Sunlight and oxygen establish oxidizing conditions under which toxins are easily degraded into non-harmful substances like water and carbon dioxide. Up to now the process, however, faces two problems: degradation rates are too low and assembly of the needed photoreactors is too expensive. Within the project 4G-PHOTOCAT, cost-efficient photocatalysts with a considerably improved degradation rate are being developed. The ultimate goal is to implement the newly developed photocatalysts into a liquid paint. Photoreactors painted with that liquid can be used, for example, for water decontamination in remote rural areas of Vietnam.

4G-PHOTOCAT allies the expertise of seven academic and three industrial partners from five European countries and two Southeast Asian countries. At the RUB, Prof. Dr. Radim Beránek collaborates with Prof. Dr. Roland A. Fischer (Inorganic Chemistry II), Prof. Dr. Martin Muhler, and Dr. Jennifer Strunk (Industrial Chemistry). The international collaborators include scientists from the University College London, J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry in Prague, Jagiellonian University Krakow, University of Helsinki, Universiti Teknologi Malaysia, Hanoi University of Agriculture. Furthermore, industrial partners from Finland (Picosun), Czech Republic (Advanced Materials), and Vietnam (Q&A) join the team.



Die Photokatalyse könnte eine der günstigsten und effizientesten Methoden sein, um Wasser von giftigen Substanzen zu befreien. Durch Licht und Sauerstoff entstehen oxidierende Bedingungen, bei denen die Gifte leicht zu unschädlichen Substanzen wie Wasser und Kohlendioxid abgebaut werden. Bislang hat das Verfahren aber zwei Probleme. Die Abbauraten sind nicht hoch genug, und es ist teuer, die notwendigen Reaktoren aufzubauen. Im Projekt 4G-PHOTOCAT werden kostengünstige Photokatalysatoren mit einer stark verbesserten Abbauraten entwickelt. Das ultimatives Ziel ist es, die neu entwickelten Photokatalysatoren in Form einer anstreichbaren Beschichtung herzustellen. Auf diese Weise angestrichene Photoreaktoren könnten bei der Wasser-Dekontamination in den ländlichen Gebieten zum Beispiel von Vietnam Einsatz finden.

An der RUB kooperiert Prof. Dr. Radim Beránek mit Prof. Dr. Roland A. Fischer (Anorganische Chemie II), Prof. Dr. Martin Muhler und Dr. Jennifer Strunk (Technische Chemie). Die internationalen Projektpartner sind Forscher vom University College London, J. Heyrovský Institut für Physikalische Chemie in Prag sowie von der Jagiellonen-Universität Krakau, Universität Helsinki, Universiti Teknologi Malaysia und Hanoi University of Agriculture. Außerdem sind industrielle Partner aus Finnland (Picosun), der Tschechischen Republik (Advanced Materials) und Vietnam (Q&A) mit an Bord.

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

Sabine Seisel and Wolfgang Schuhmann

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

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

email: sabine.seisel@rub.de;

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/ces/BIOENERGY/start.html>

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

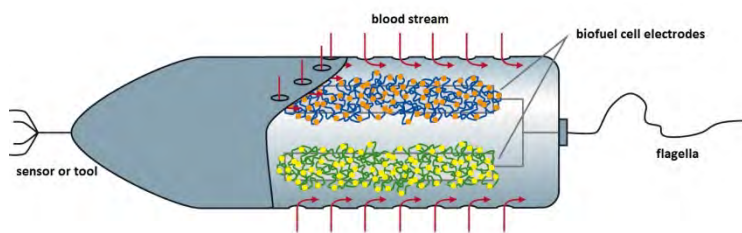


figure adapted from J. Weiler (RUBIN, 2010; Ruhr-University Bochum)

Small parts for such sensors already exist. What is missing is a self-sustaining power supply. Thus, the main objective of BIOENERGY is to develop efficient and stable biofuel cells. In the frame work of a Marie-Curie Initial Training Networks (ITN) the EU is supporting the project „BIOENERGY“ mit 3.92 Millions Euro for four years beginning from october 2013 on. The project will be coordinated by the Chair of Analytical Chemistry at RUB.

Using blood glucose as fuel the electrodes of the fuel cell have to be accessible and have not to be surrounded by walls. In addition, while miniaturizing the biofuel cells the walls become size limiting. The main emphasis of BIOENERGY will be orientated towards microscale, flexible, and if necessary transparent and potentially implantable bioelectric devices.

An international consortium from 13 European countries from research and industry will be responsible for the training of 11 PhD student and 4 postdocs which will be educated in physics, chemistry, biochemistry, biology, electronics, material science, and medicine. The fellows will first develop individual components like electrodes, enzymes or mediator. During two joint measurement campaigns at Ruhr-Universität Bochum, Germany the component will be integrated and optimized in order to obtain a biofuel cell ready to use.

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

Mini-Bauteile für diese Sensoren oder Transporter gibt es bereits – was fehlt, ist eine autarke Energieversorgung. Die Lösung könnten wandlose, implantierbare Biobrennstoffzellen sein, denen Zucker im Blut als Treibstoff dient. Um diese zu entwickeln, fördert die EU im Rahmen eines Marie-Curie Initial Training Networks (ITN) das Projekt „BIOENERGY“ mit 3,92 Millionen Euro über vier Jahre beginnend im Oktober 2013. Koordiniert wird das Projekt vom Lehrstuhl für Analytische Chemie der Ruhr-Universität Bochum (RUB).

Ein internationales Konsortium aus 13 europäischen Partnern aus Forschung und Industrie schult insgesamt 11 Doktoranden und 4 Postdoktoranden. Die Ausbildung umfasst die Bereiche Physik, Chemie, Biochemie, Biologie, Elektronik, Materialwissenschaften, Softwareentwicklung und Medizin. Im Projektverlauf bauen die Stipendiaten zunächst die individuellen Komponenten der Biobrennstoffzelle wie Elektroden, Enzyme und Mediatoren auf. In zwei gemeinsamen Messkampagnen an der RUB fügen sie die Komponenten zusammen und optimieren, bis am Ende eine funktionstüchtige Biobrennstoffzelle vorliegt.

Forschungsbau ZEMOS

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

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

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



Planning-Phase of the Research Building and Start of the Construction

After extensive planning and bidding procedures performed in 2013 by the project team (RUB and BLB employees), there are now the first building activities visible on campus since January 2014. In 2013 the progress of the construction process was blocked by changes in interpretations of building regulations. But luckily the planning stop was countermanded. Thus, since January 2014, the new research building is constructed as direct neighbor in extension of the N-Buildings. The transfer of the new building to the RUB scientist by the BLB is envisioned to be at the end of February 2016. In the beginning of March 2014 the ditch for the foundation with a depth of about 7 m is finalized to about 70%. The diggers removed solid rocks but also stone coal (as visible on the photograph).



© RUB, Foto: Nelle



Planungsphase des Forschungsbaus und Start der Baustelle

Nach umfangreichen Planungs- und Ausschreibungsvorbereitungen in 2013 durch das Projektteam (RUB- und BLB-Mitarbeiter) werden nun im Januar 2014 die ersten Bauaktivitäten auf dem Baugelände sichtbar. Seit Januar 2014 nun der Forschungsneubau als direkter Nachbar in Verlängerung zur N-Reihe unmittelbar an der Oststrasse errichtet wird. Für Ende Februar 2016 ist die Übergabe des Neubaus an die RUB Nutzer durch den BLB geplant. Anfang März 2014 ist die Baugrube mit 7 m Tiefe fast zu 70% fertig gestellt. Die Bagger haben sich durch den im Bereich der Baugrube befindlichen Fels gegraben, aber auch Steinkohle (wie auf dem Foto sichtbar) freigelegt.

Pressemitteilung 29 der RUB (2014): Startschuss für Forschungsbau | ZEMOS Expertise zu Lösungsmittelprozessen bündeln | Grundsteinlegung für Mai geplant - <http://aktuell.ruhr-uni-bochum.de/pm2014/pm00029.html.de>

Pressemitteilung 297 der RUB (2013): Mit ZEMOS anknüpfen an die Weltspitze der Solvationsforschung | NRW-Forschungsministerin setzt Weiterbau durch | Das ehrgeizige Projekt drohte an veränderten Genehmigungsvorschriften zu scheitern - <http://aktuell.ruhr-uni-bochum.de/pm2013/pm00297.html.de>

Exzellenzcluster RESOLV

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

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

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



Die Verteidigung der Anträge der RUB im Rahmen der Exzellenzinitiative war im Fokus im Frühjahr 2011. The Cluster of Excellence RESOLV (Ruhr Explores Solvation: EXC 1069) is funded with 28 Mio. EUR by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) within the framework of the German Excellence Initiative. The project commenced on November the 1st, 2012, and the funding period will end on October the 31st, 2017. Prof. Dr. Martina Havenith-Newen is the Speaker and Coordinator of RESOLV. The Ruhr-Universität Bochum (RUB) hosts the Cluster of Excellence.

The scientists of all research areas meet regularly. In addition, there are annual workshops offered for Research Areas A, B, and C. RESOLV invites national and international speakers to lecture on the in the field of Solvation Science within the frame work of the RESOLV colloquia (<http://www.rub.de/gss/colloquia.html.en>). The International Faculty (IF) Solvation Science provides an international network of top institutions to foster long-term scientific collaborations.



Activities of RESOLV in 2013

Graduate School Solvation Science

As part of RESOLV, a new international Graduate School Solvation Science (GSS) for doctoral students was established in January 2013 (<http://www.rub.de/gss/index.html.en>). Dean of the GSS is Prof. Dr.-Ing. Marcus Petermann and Science Manager of the GSS is Dr. Rachel Graves. The members of the GSS were increased from 2 in January 2013 to 51 in February 2014.



TranSOLV

In 2013 TranSOLV was established: TranSOLV realizes the direct and rapid transfer of knowledge obtained by the fundamental research done in RESOLV into technologically relevant processes and products via projects with industrial partners (<http://www.rub.de/solvation/transolv/transolv.html.en>). TranSOLV and the Graduate School Solvation Science have organized a lecture series for students presented by industry representative with the title „Careers in Industry“.

International Opening Symposium “Solvation Science”

RESOLV was launched at the Ruhr-Universität Bochum by means of an International Scientific Symposium on the 4th and 5th of June 2013, which brought speakers from all over the world to Bochum to discuss the topic of “Solvation Science”, including internationally renowned scientists from UC Berkeley, ETH Zürich, École Normale Supérieure Paris and Yale. Philip Ball, Science Writer from England, hold the opening speech with the title “From damnation to solvation”. Prof. Dr. Irit Sagi from the Weizmann Institute in Israel and representa-

tive of the “International Faculty Solvation Science” followed by opening the scientific part of the Symposium; she highlighted the role of water in enzymatic catalysis. The sheer breadth of the field of Solvation Science is reflected in the Symposium itself; the topics range from enzymatic reactions in biology to the solvation of individual, charged particles at low temperatures.



International Female Faculty (IFF)

The first International Female Faculty Meeting (International Women Scientist Meeting) was held on the 3rd and 4th of October 2013 at the ETH Zurich (http://www.ruhr-uni-bochum.de/solvation/gender_events/gender_activities.html.en). It was held in conjunction with the NCCR MUST (Molecular Ultrafast Science and Technology) and 35 scientists from 14 German and Swiss universities took part. The goal of the IFF meeting was to present female role models in the field of chemistry and physics in order to encourage early career researchers for a career in science. A professional coach explained how to overcome challenges in a male-dominated environment.

RESOLV: www.rub.de/solvation

GSS: www.ruhr-uni-bochum.de/gss/index.html.en

Umbaumaßnahme des Exzellenzclusters

Im Rahmen der Startphase des DFG geförderten Exzellenzclusters RESOLV (Ruhr Explores Solvation; EXC 1069) unterstützt die Ruhr-Universität Bochum (RUB) die Forscher und Studierenden mit einer Infrastrukturmaßnahme in der Fakultät für Chemie und Biochemie: Büro und Laborflächen sollen für die Forschung rund um Lösungsmittelprozesse zur Verfügung gestellt werden.

In knapp sechs Monaten Bauzeit entstanden auf den 600 m² Fläche der Fakultätsbibliothek der Fakultät für Chemie und Biochemie im Gebäude NC auf der Ebene 03 drei neue Nutzungsbereiche: (1) die neu gestaltete Fakultätsbibliothek, (2) neue Büroflächen für RESOLV sowie (3) die Optimierung von studentischen Arbeitsflächen. Im ersten Bauabschnitt wurde nach einer umfangreichen Schadstoffsanierung der nördliche Bereich für eine neu strukturierte Bibliothek hergerichtet. Hinter dem umgestalteten Eingangsbereich liegt die Bibliothek, die Ansprüche an modernes Lernen und Arbeiten erfüllt. Es stehen neben der fachlichen Literatur großzügige Lese- und Arbeitsbereiche mit Multimedia-Ausstattung sowie Gruppenarbeitsflächen mit digitalen Leseplätzen und Schallboxen für eine ungestörte Lern- und Leseatmosphäre zur Verfügung.

Als Ausgleich für die nun etwas kleinere Bibliotheksfläche wurden im südlichen Eingangsbereich des Gebäudes NC 03 Arbeitsflächen für Studierenden eingerichtet. Mit Stahl-Glaselementen ist der Bereich sowohl visuell als auch akustisch von den Bewegungsflächen der Ebene abgetrennt. Zusätzliche Deckensegel sorgen für eine optimale Raumatmosphäre.



Im zweiten Bauabschnitt im Südbereich der ehemaligen Bibliothek wurden Arbeitsbereiche und Büros für das Exzellenzcluster RESOLV eingerichtet. Auch hier entstanden nach einer umfangreichen Schadstoffsanierung helle, moderne Arbeitsräume und Büros sowie mehrere Besprechungsbereiche. Die Fläche wird von großzügigen Glastrennwänden gegliedert. Die Versorgungs- und Datentechnik wurde auf den neuesten Stand gebracht. Im Dezember 2013 konnte die Fläche wieder vollständig an die Nutzer übergeben werden. So steht den Wissenschaftlern/innen, den Nachwuchsgruppenleiter/innen und den neu berufenen Professor/innen von RESOLV - schon gut ein Jahr nach Start des Projektes im November 2012 - eine moderne Büroinfrastruktur zur Verfügung. In der nächsten Bauphase werden noch weitere Umbauten für neue Labore realisiert werden.

Autoren: Thomas Lilje (Dez. 5), Claudia Haun (Dez. 1), Sabine Borgmann (RESOLV)

Veröffentlichungen 2013

Anorganische Chemie 1

- H. B. Albada, P. Prochnow, S. Bobersky, S. Langklotz, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *ACS Comb. Sci.* **15** (2013) 585–592. Short Antibacterial Peptides with Significantly Reduced Hemolytic Activity can be Identified by a Systematic L to D Exchange Scan of their Amino Acid Residues
- A. Groß, D. Habig, N. Metzler-Nolte, *ChemBioChem* **14** (2013) 2472–2479. Synthesis and Structure Activity Relationship Study of Organometallic Bioconjugates of the Cyclic Octapeptide Octreotate
- M. Strack, N. Metzler-Nolte, H. B. Albada, *Org. Lett.* **15** (2013) 3126–3129. C-Terminal Acetylene Derivatized Peptides via Silyl-Based Alkyne Immobilization
- S. M. Meier, M. Novak, W. Kandoller, M. A. Jakupiec, V. B. Arion, N. Metzler-Nolte, B. K. Keppler, C. G. Hartinger, *Chem. Eur. J.* **19** (2013) 9297–9307. Identification of the Structural Determinants for Anticancer Activity of a Ruthenium Arene Peptide Conjugate
- R. Rubbiani, E. Schuh, A. Meyer, J. Lemke, J. Wimberg, N. Metzler-Nolte, F. Meyer, F. Mohr, I. Ott, *Med. Chem. Commun.* **4** (2013) 942–948. TrxR Inhibition and Antiproliferative Activities of Structurally Diverse Gold N-Heterocyclic Carbene Complexes
- F. Wieberneit, A. Korste, H. B. Albada, N. Metzler-Nolte, R. Stoll, *Dalton Trans.* **42** (2013) 9799–9802. Structural and biological implications of the binding of Leu-enkephalin and its metal derivatives to opioid receptors
- M. Wenzel, M. Patra, C. H. R. Senges, I. Ott, J. J. Stepanek, A. Pinto, P. Prochnow, C. Vuong, S. Langklotz, N. Metzler-Nolte, J. E. Bandow, *ACS Chem. Biol.* **8** (2013) 1442–1450, DOI: 10.1021/cb4000844. Analysis of the Mechanism of Action of Potent Antibacterial Hetero-tri-organometallic Compounds: A Structurally New Class of Antibiotics
- M. Ma, A. Betard, I. Weber, R. A. Fischer, N. Metzler-Nolte, *Crystal Growth & Design* **13** (2013) 2286–2291. Iron-based Metal-Organic Frameworks MIL-88B and NH₂-MIL-88B: High Quality Microwave Synthesis and Solvent-induced Lattice "Breathing"
- M. Ma, H. Noei, B. Mienert, J. Niesel, E. Bill, M. Muhler, R. A. Fischer, Y. Wang, U. Schatzschneider, N. Metzler-Nolte, *Chem. Eur. J.* **19** (2013) 6785–6790. Iron metal-organic frameworks MIL-88B and NH₂-MIL-88B for the loading and delivery of the gas transmitter carbon monoxide
- T. Güden-Silber, K. Klein, M. Seitz, *Dalton Trans.* **42** (2013) 13882–13888. . 4,4'-Bis(trifluoromethyl)-2,2'-bipyridine – a multipurpose ligand scaffold for lanthanoid-based luminescence/¹⁹F NMR probes
- J. Wahsner, M. Seitz, *Inorg. Chem.* **52** (2013) 13301–13303. Perdeuterated 2,2'-Bipyridine-6,6'-dicarboxylate: An Extremely Efficient Sensitizer for Thulium Luminescence in Solution
- V. Sharma, F. Böhm, M. Seitz, G. Schwaab, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 8383–8391. From Solvated Ions to Ion-Pairing: A THz Study of Lanthanum(III) Hydration
- X. Iwanowa, J. Strunk, E. Loeffler, M. Muhler, K. Merz, *Physica Status Solidi B* **250** (2013) 1165–1173. Surface reaction of 2-propanol on modified Keggin type polyoxometalates: In situ IR spectroscopic investigation of the surface acid-base properties

- O. V. Shishkin, S. V. Shishkina, A. V. Maleev, R. I. Zubatyuk, V. Vasylyeva, K. Merz, *ChemPhysChem* **14** (2013) 847-856. Influence of Deuteration and Fluorination on the Supramolecular Architecture of Pyridine N-Oxide Crystals
- N. A. Heutz, P. Dolcet, A. Birkner, M. Casarin, K. Merz, S. Gialanella, S. Gross, *Nanoscale* **5** (2013) 10534-10541. Inorganic chemistry in a nanoreactor: Au/TiO₂ nanocomposites by photolysis of a single-source precursor in miniemulsion
- F. Li, K. Bravo-Rodriguez, M. Fernandez-Oliva, J. Ramirez-Anguila, K. Merz, M. Winter, C. W. Lehmann, W. Sander, E. Sanchez-Garcia, *J. Phys. Chem. B* **117** (2013) 10785-10791. Stereochemistry Rules: A Single Stereocenter Changes the Conformation of a Cyclic Tetrapeptide
- N. Heutz, K. Merz, *GIT Labor-Fachzeitschrift* **57** (2013) 316-317. The significance of heterogeneous catalysis. Supported catalysts in reaction processes
- R. Goy, U.-P. Apfel, C. Elleouet, D. Escudero, M. Elstner, H. Görls, J. Talarmin, P. Schollhammer, L. González, W. Weigand, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2013) 4466-4472. A Silicon-Heteroaromatic System as Photosensitizer for Light-Driven Hydrogen Production by Hydrogenase Mimics
- L. R. Almazahreh, U.-P. Apfel, W. Imhof, H. Görls, M. El-khateeb, W. Weigand, *Organometallics* (2013) 4523-4530. A Novel [FeFe] Hydrogenase Model with a (SCH₂)₂P=O Moiety
- U.-P. Apfel, W. Weigand, *ChemBioChem* **14** (2013) 2237-2238. Biomimetic Assembly of the [FeFe] Hydrogenase: Synthetic Mimics in a Biological Shell

Anorganische Chemie 2

- A. Devi, *Coord. Chem. Rev.* **257 (23-24)** (2013) 3332-3384. Old Chemistries' for new applications: Perspectives for development of precursors for MOCVD and ALD applications
- K. Xu, A. R. Chaudhuri, H. Parala, D. Schwendt, T. de los Arcos, H. J. Osten, A. Devi, *J. Mater. Chem. C* **1(25)** (2013) 3939-3946. Atomic layer deposition of Er₂O₃ thin films from Er tris-guanidinate and water: process optimization, film analysis and electrical properties
- M. Krasnopolski, C. G. Hrib, R. W. Seidel, M. Winter, H.-W. Becker, D. Rogalla, R. A. Fischer, F. T. Edelmann, A. Devi, *Inorg. Chem.* **52** (2013) 286-296. Homoleptic gadolinium amidinates as precursors for MOCVD of oriented gadolinium nitride thin films
- T. Blanquart, J. Niinisto, N. Aslam, M. Banerjee, Y. Tomczak, M. Gavagnin, V. Longo, E. Puukilainen, H. Wanzenboeck, W. M. M. Kessels, *Chem. Mater.* **25(15)** (2013) 3088-3095. [Zr(NEtMe)₂(guan-NEtMe)₂] as a novel atomic layer deposition precursor: ZrO₂ film growth and mechanistic studies
- M. Reiners, K. Xu, N. Aslam, A. Devi, S. Hoffmann-Eifert, R. Waser, *Chem. Mater.* **25** (2013) 2934-2943. Study of the growth and crystallization of TiO₂ thin films by ALD using a novel amido guanidinate titanium source and tetrakis-dimethylamido-titanium
- N. B. Srinivasan, T.B. Thiede, T. de los Arcos, V. Gwildies, M. Krasnopolski, H.-W. Becker, D. Rogalla, A. Devi, R. A. Fischer, *Surf. Coat. Technol.* **230** (2013) 130-136. Transition metal nitride thin films grown by MOCVD using amidinato based complexes [M(NtBu)₂{(iPrN)₂CMe₂}] (M = Mo, W) as precursors

- S. J. Kim, K. Xu, H. Parala, R. Beranek, M. Bledowski, K. Sliozberg, H.-W. Becker, D. Rogalla, D. Barreca, C. Maccato, C. Sada, W. Schuhmann, R. A. Fischer, A. Devi, *Chem. Vap. Deposition* **19** (2013) 45-52. Intrinsic nitrogen-doped CVD-grown TiO₂ Thin Films from all-N-coordinated Ti precursors for photoelectrochemical applications
- M. Krasnopolski, R. W. Seidel, R. Goddard, J. Breidung, M. Winter, A. Devi, R. A. Fischer, *J. Mol. Str.* **1031** (2013) 239-245. A Z' = 6 crystal structure of (E) -N, N'-dicyclohexylacetamide
- H. Oh, S. B. Kalidindi, Y. Um, S. Bureekaew, R. Schmid, R. A. Fischer, M. Hirscher, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 13219-13222. A Cryogenically Flexible Covalent Organic Framework for Efficient Hydrogen Isotope Separation by Quantum Sieving
- B. Mei, Ch. Wiktor, S. Turner, A. Pougin, G. van Tendeloo, R. A. Fischer, M. Muhler, J. Strunk, *ACS Catalysis* **3** (2013) 3041-3049. Evidence for Metal Support Interactions in Au modified TiO_x/SBA -15 materials prepared by photo-deposition
- M. Tu, S. Wannapaibon, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* **42** (2013) 16029-16035. Programmed functionalization of SURMOFs via liquid phase heteroepitaxial growth and post-synthetic modification
- R. W. Seidel, C. Ganesamoorthy, S. Loerke, M. V. Winter, C. Gemel, R. A. Fischer, *Acta Cryst.*, **C69** (2013) 573-576. catena -Poly[[[(tetrahydrofuran-κO)potassium]-μ-(η⁵:η⁵)-2,3,4,5-tetramethyl-1-n-pentylcyclopentadienyl]
- M. Molon, C. Gemel, W. Seidel, P. Jerabek, G. Frenking, R. A. Fischer, *Inorg. Chem* **52** (2013) 7152-7160. The Organozinc Rich Compounds [Cp*₂M(ZnR)₅] (M = Fe, Ru; R = Cp*, Me, Cl, Br)
- S. Henke, A. Schneemann, R. A. Fischer, *Adv. Funct. Mater.* **48** (2013) 5990-5996. Massive anisotropic thermal expansion and thermo-responsive breathing in metal-organic frameworks modulated by linker functionalization. Cover.
- K. Khaletskaya, J. Reboul, M. Meilikhov, M. Nakahama, S. Diring, M. Tsujimoto, S. Isoda, F. Kim, K. Kamei, R. A. Fischer, S. Kitagawa, S. Furukawa, *J. Am. Chem. Soc.* **135** (2013) 10998-11005. Integration of porous coordination polymers and gold nano-rods into core-shell mesoscopic composites towards light-induced molecular release. Cover.
- K. Freitag, H. Banh, C. Ganesamoorthy, C. Gemel, R. W. Seidel, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* **42** (2013) 10540-10544. Cp* as a removable protecting Group: Low Valent Zn(I) Compounds by Reductive Elimination, Protolytic and Oxidative Cleavage of Zn-Cp*
- M. Molon, C. Gemel, R. A. Fischer, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2013) 3616-3622. From AlCp* and GaCp* Ligated Ruthenium Hydrides to Zinc-rich Heterometallic Complexes
- M. Molon, K. Dilchert, C. Gemel, R. W. Seidel, J. Schaumann, R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **52** (2013) 14275-14283. Clusters [M(GaCp*)₂(CNR)₂] (M = Ni, Pd, Pt): synthesis, structure, and Ga/Zn exchange reactions
- O. Kozachuk, M. Meilikhov, K. Yushenko, A. Scheemann, B. Jee, A. V. Kuttathayil, M. Bertmer, C. Sternemann, A. Pöpl, R. A. Fischer, *Eur. J. Inorg. Chem* (2013) 4546-4557. A solid solution approach to mixed-metal MOFs: detailed characterization of local structures, defects and breathing behaviour of Al/V frameworks of MIL-53/47 type. Cover.

- Doddi, G. Prabusankar, C. Gemel, M. Winter, R. A. Fischer, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2013) 3609-3615. N-Heterocyclic Gallylene Supported Organoruthenium Derivatives: Synthesis, Structure and C–H activation
- M. Ma, H. Noei, B. Mienert, J. Niesel, E. Bill, M. Muhler, R.A. Fischer, Y. Wang, U. Schatzschneider, N. Metzler-Nolte, *Chem. Eur. J.* **19** (2013) 6785-6790. Iron metal-organic frameworks MIL-88B and NH₂-MIL-88B for the loading and delivery of the gasotransmitter carbon monoxide
- M. Ma, A. Bétard, I. Schlytschkow, R. A. Fischer, N. Metzler-Nolte, *Cryst. Growth. Des.* **13** (2013) 2286–229. Iron-based Metal-Organic Frameworks MIL-88B and NH₂-MIL-88B: High Quality Microwave Synthesis and Solvent-induced Lattice “Breathing”
- H. Noei, O. Kozachuk, S. Amirjalayer, S. Bureekaew, M. Kauer, R. Schmid, B. Marler, M. Muhler, R. A. Fischer, Y. Wang, *J. Phys. Chem. C.* **117** (2013) 5658-5666. “CO adsorption on HKUST-analogous mixed-valence ruthenium metal-organic framework studied by UHV-FTIR spectroscopy and DFT calculations
- Bo Liu, Min Tu, D. Zacher, R. A. Fischer, *Adv. Funct. Mater.* **23** (2013) 3790–3798. Multi Variate Surface Mounted Metal-Organic Frameworks
- S. B. Kalidindi, R. A. Fischer, *Phys. Stat. Solidi B* **250** (2013) 1119-1127. Covalent organic frameworks and their metal nanoparticle composites: Prospects for hydrogen storage
- H. Oh, K. S. Park, S. B. Kalidindi, R. A. Fischer, M. Hirscher, *J. Mater. Chem. A*, **1** (2013) 3244-3248. Quantum cryo-sieving for hydrogen isotope separation in microporous frameworks: an experimental study on the correlation between effective quantum sieving and pore size. Cover.
- C. Ganesamoorthy, S. Loerke, C. Gemel, M. Winter, P. Jerabek, G. Frenking, R. A. Fischer, *Chem. Commun.* **49** (2013) 2858-2860. Reductive Elimination: A Pathway to Low-Valent Aluminium Species. Cover.
- Bo Liu, Min Tu, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 3402–3405. Metal–Organic Framework Thin Films: Crystallite Orientation Dependent Adsorption
- M. Meilikhov, S. Furukawa, K. Hirai, R. A. Fischer, S. Kitagawa, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 341–345. Binary Janus Porous Coordination Polymer Coatings for Sensor Devices with Tunable Analyte Affinity
- Doddi, C. Gemel, M. Winter, R. A. Fischer, C. Goedecke, H. S. Rzepa, G. Frenking, *Angew. Chem.-Int. Ed.* **52** (2013) 450-454. Low-Valent Ge₂ and Ge₄ Species Trapped by N-Heterocyclic Gallylene
- S. B. Kalidindi, C. Wiktor, A. Ramakrishnan, J. Wessing, A. Schneemann, G. Van Tendeloo, R. A. Fischer, *Chem. Commun.* **49** (2013) 463-465. Lewis base mediated efficient synthesis and solvation-like host-guest chemistry of covalent organic framework-1
- Doddi, C. Gemel, R. W. Seidel, M. Winter and R. A. Fischer, *Polyhedron* **52** (2013) 1103-1108. Coordination Compounds of TiX₄ (X = F, Cl) with a Bulky N-heterocyclic Carbene: Syntheses, Characterization and Molecular Structures
- S. Bureekaew, S. Amirjalayer, M. Tafipolsky, C. Spickermann, T. K. Roy, R. Schmid, *Phys. Stat. Sol. B* **250** (2013) 1128-1141. MOF-FF - A flexible first principles derived Force Field for Metal-Organic Frameworks

- S. Bureekaew, R. Schmid, *Cryst. Eng. Comm.* **15** (2013) 1551-1562. Hypothetical 3D-Periodic Covalent Organic Frameworks: Exploring the Possibilities by a First Principles Derived Force Field
- J. Macak, T. Kohoutek, L. Wang, R. Beranek, *Nanoscale* **5** (2013) 9541-9545. Fast and robust infiltration of functional material inside titania nanotube layers: case study of a chalcogenide glass sensitizer
- B. Mei, H. Byford, M. Bledowski, L. Wang, J. Strunk, M. Muhler, R. Beranek, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **117** (2013) 48-53. Beneficial effect of Nb doping on the photoelectro-chemical properties of TiO₂ and TiO₂-polyheptazine hybrids
- M. Bledowski, L. Wang, A. Ramakrishnan, R. Beranek, *J. Mater. Res.* **28** (2013) 411-417. TiO₂-Polyheptazine Hybrid Photoanodes: Effect of Co-Catalysts and External Biases on Visible Light-Driven Water Splitting
- R. D. Costa, F. Werner, X. Wang, P. Grönninger, S. Feihl, F. T. U. Kohler, P. Wasserscheid, S. Hibler, R. Beranek, K. Meyer, D. M. Guldi, *Adv. Energy Mater.* **3** (2013) 657-665. Beneficial Effects of Liquid Crystalline Phases in Solid-State Dye-Sensitized Solar Cells

Anorganische Chemie 3

- A. Metlen, B. Mallick, R.W. Murphy, A.-V. Mudring, R.D. Rogers, *Inorg. Chem.* **52** (2013) 13997-14009. Phosphonium Chloromercurate Room Temperature Ionic Liquids of Variable Composition
- S. Schulz, S. Heimann, K. Kaiser, W. Assenmacher, T. Brüggemann, B. Mallick, A.-V. Mudring, *Inorg. Chem.* **52** (2013) 14326-14333. Solution based synthesis of GeTe octahedra at low temperature
- C. Walbaum, M. Richter, U. Sachs, I. Pantenburg, S. Riedel, A.-V. Mudring, G. Meyer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 12732-12735. Iodine-iodine bonding makes tetra(diiodide)chloride, [Cl(I₂)₄]-, planar
- T. Alammar, H. Noei, Y. Wang, A.-V. Mudring, *Nanoscale*, **5** (2013) 8045-8055. Mild yet phase-selective preparation of TiO₂ nanoparticles from ionic liquids – a critical study
- M. Yang, B. Mallick, A.-V. Mudring, *Cryst. Growth Des.* **13** (2013) 3068-3077. On the mesophase formation of 1,3-dialkylimidazolium ionic liquids
- S. Laufer, S. Strobel, T. Schleid, J. Cybinska, A.-V. Mudring, I. Hartenbach, *N. J. Chem.* **37** (2013) 1919-1926. Yttrium(III) oxomolybdates(VI) as potential host materials for luminescence applications: an investigation of of Eu³⁺-doped Y₂[MoO₄]₃ and Y₂[MoO₄]₂[Mo₂O₇]
- C. Lorbeer, A.-V. Mudring, *ChemSusChem*, **6** (2013) 2382-2387. Ionic Liquid-Assisted Route to Nanocrystalline Single-Phase Phosphors for White Light Emitting Diodes
- C. Lorbeer, A.-V. Mudring, *J. Phys. Chem. C*, (2013) 12229-12238. White Light Emitting Single Phosphors via Triply Doped LaF₃ Nanoparticles
- Q. Ju, A.-V. Mudring, *RSC Advances*, **3** (2013) 8172-8175. Phase and Morphology Selective Interface-Assisted Synthesis of Highly Luminescent Ln³⁺-doped NaGdF₄ Nanorods
- K. Richter, P. S. Campbell, T. Bäcker, A. Schimitzek, D. Yaprak, A.-V. Mudring, *physica status solidi b*, **250** (2013) 1152-1164. Ionic Liquids for the Synthesis of Nanoparticles

- P. S. Campbell, C. Lorbeer, J. Cybinska, A.-V. Mudring, *Adv. Funct. Mater.*, **23** (2013) 2924-2931. One-Pot Synthesis of Luminescent Polymer-Nanoparticle Composites from Task-Specific Ionic Liquids
- I.S. Helgadottir, P.P. Arquillière, P. Bréa, C.C. Santini, P.-H. Haumesser, K. Richter, A.-V. Mudring, M. Aouine: *Microelectronic Engineering*, **107** (2013) 229-232. Synthesis of bimetallic nanoparticles in ionic liquids: Chemical routes vs physical vapor deposition
- Q. Ju, P.S. Campbell, A.-V. Mudring, *J. Mater. Chem. B*, **1** (2013) 179-185. Interface-assisted ionothermal synthesis, phase tuning, surface modification and bioapplication of Ln^{3+} -doped NaGdF_4 nanocrystals

Organische Chemie 1

- S. H. Jungbauer, S. Schindler, F. Kniep, S. M. Walter, L. Rout, S. M. Huber, *Synlett* **24** (2013) 2624-2628. Multidentate Halogen-Bond Donors as Lewis Acidic Activators or Catalysts in Halide Abstraction Reactions
- F. Kniep, S. H. Jungbauer, Q. Zhang, S. M. Walter, S. Schindler, I. Schnapperelle, E. Herdtweck, S. M. Huber, *Angew. Chem.* **125** (2013) 7166-7170. Organokatalyse mit neutralen multidentaten Halogenbrückendonoren.
- S. M. Huber, J. D. Scanlon, E. Jimenez-Izal, J. M. Ugalde, I. Infante, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 10350-10357. On the directionality of halogen bonding
- S. M. Walter, S. H. Jungbauer, F. Kniep, S. Schindler, E. Herdtweck, S. M. Huber, *J. Fluorine Chem.* **150** (2013) 14-20. Perfluorinated versus cationic multidentate halogen-bond donors: A direct comparison
- S. M. Walter, M. G. Sarwar, M. G. Chudzinski, E. Herdtweck, A. J. Lough, S. M. Huber, M. S. Taylor, *CrystEngComm* **15** (2013) 3097-3101. Halogen bonding and π - π interactions in the solid state structure of a butadiynylene-linked bis(iodoperfluoroarene)

Organische Chemie 2

- M. Sajid, A. Lawzer, W. Dong, C. Rosorius, W. Sander, B. Schirmer, S. Grimme, C. G. Daniliuc, G. Kehr, G. Erker, *J. Am. Chem. Soc.* **135** (2013), 18567-18574. Carbonylation Reactions of Intramolecular Vicinal Frustrated Phosphine / Borane Lewis Pairs
- F. Li, K. Bravo-Rodriguez, M. Fernandez-Oliva, J. M. Ramirez-Angueta, K. Merz, M. Winter, C. W. Lehmann, W. Sander, E. Sanchez-Garcia, *J. Phys Chem. B* **117** (2013), 10785-10791. Stereochemistry Rules: A Single Stereocenter Changes the Conformation of a Cyclic Tetrapeptide
- S. V. Chapyshev, D. V. Korchagin, P. Neuhaus, W. Sander, *Beilstein J. Org. Chem.* **9** (2013), 733-742. High-spin intermediates of the photolysis of 2,4,6-triazido-3-chloro-5-fluoropyridine
- F. Li, K. Bravo-Rodriguez, C. Phillips, R. W. Seidel, F. Wieberneit, R. Stoll, N. L. Doltsinis, E. Sanchez-Garcia, W. Sander, *J. Phys. Chem. B* **117** (2013), 3560-3570. Conformation and Dynamics of a Cyclic Disulfide-Bridged Peptide: Effects of Temperature and Solvent
- G. Desiraju, M. A. Johnson, W. Sander, *ChemPhysChem.* **14** (2013), 631-633. Aggregation of Small Molecules: From Dimers to Crystals

- M. J. Smith, S. Muller, W. Sander, G. Bucher, *J. Hazard. Mat.* (2013), 246-247, 154-162. Mechanisms of the thermal decay of chlorpropham
- R. Crespo-Otero, K. Bravo-Rodriguez, S. Roy, T. Bernighaus, W. Thiel, W. Sander, E. Sanchez-Garcia, *ChemPhysChem*. **14** (2013), 805-811. Interactions of Aromatic Radicals with Water
- R. Crespo-Otero, A. Mardyukov, E. Sanchez-Garcia, M. Barbatti, W. Sander, *ChemPhysChem*. **14** (2013), 827-836. Photochemistry of N-Methylformamide: Matrix Isolation and Nonadiabatic Dynamics

Physikalische Chemie 1

- J. Henzl, K. Boom, K. Morgenstern, *J.Am.Chem.Soc.* **135** (2013) 11501-11504. Reorientation of a Single Bond within an Adsorbed Molecule by Tunneling Electrons
- S. Heidorn, C. Bertram, J. Koch, K. Boom, F. Mathaei, A. Safiei, J. Henzl, K. Morgenstern, *J.Phys.Chem. C* **117** (2013) 16095-16103. Influence of Substrate Surface-Induced Defects on the Interface State between NaCl(100) and Ag(111)
- K. Morgenstern, N. Lorente, K.-H. Rieder, *Phys. Status Solidi B* **1-81** (2013) DOI 10.1002/pssb.201248392. Controlled manipulation of single atoms and small molecules using the scanning tunnelling microscope
- C. Makbul, D. C. Aruxandei, E. Hofmann, D. Schwarz, E. Wolf, C. Herrmann, *Biochemistry* **52** (2013) 1045-1054. Structural and thermodynamic characterization of Nore1-SARAH: a small, helical module important in signal transduction networks
- M. Ritzefeld, V. Walhorn, C. Kleineberg, A. Bieker, K. Kock, C. Herrmann, D. Anselmetti, N. Sewald, *Biochemistry* **52** (2013) 8177-8186. Cooperative Binding of PhoBDBD to its Cognate DNA Sequence-A Combined Application of Single-Molecule and Ensemble Methods
- M. Schöpel, K. F. Jockers, P.M. Düppe, J. Autzen, V. N. Potheraveedu, S. Ince, K.T. Yip, R. Heumann, C. Herrmann, J. Scherkenbeck, R. Stoll, *J. Med. Chem.* **56** (2013) 9664-9672. Bisphenol A Binds to Ras Proteins and Competes with Guanine Nucleotide Exchange: Implications for GTPase-Selective Antagonists
- A. Ehrkamp, C. Herrmann, R. Stoll, R. Heumann, *Cancers* **5** (2013) 639-661. Ras and rheb signaling in survival and cell death
- V. Schott, H. Oberhofer, A. Birkner, M. Xu, Y. Wang, M. Muhler, K. Reuter, Ch. Wöll, *Angew. Chem.* **125** (2013) 12143-12147. Chemische Aktivität von dünnen Oxidschichten: Starke Träger-Wechselwirkungen ergeben eine neue ZnO-Dünnschichtphase. *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 11925-11929. Chemical Activity of Thin Oxide Layers: Strong Interactions with the Support Yield a New Thin-Film Phase of ZnO.
- U. Köhler, M. Kroll, T. Löber, A. Birkner, V. Schott, Ch. Wöll, *Phys.Status Solidi B* **250** (2013) 1222-1234. The thermally induced interaction of Cu and Au with ZnO single crystal surfaces
- W. Grünert, H. Gies, M. Muhler, S. Polarz, C.W. Lehmann, D. Großmann, M. van den Berg, O.P. Tkachenko, A. De Toni, I. Sinev, M. Bandyopadhyay, V. Narkhede, A. Dreier, K.V. Klementiev, A. Birkner, E. Löffler, *Phys. Status Solidi B* **250** (2013) 1081-1093. Metal-supported catalysts encapsulated in mesoporous solids: Challenges and opportunities of a model concept,

- A. Zychma, R. Wansing, V. Schott, U. Köhler, Ch. Wöll, M. Muhler, A. Birkner, *Phys. Status Solidi B* **250** (2013) 1071-1080. Elucidating elementary processes at Cu/ZnO interfaces: A microscopical approach
- N.A. Heutz, P. Dolcet, A. Birkner, M. Casarin, K. Merz, S. Gialanella, A. Gross, *Nanoscale* **5** (2013) 10534-10541. Inorganic chemistry in a nanoreactor: Au/TiO₂ nanocomposites by photolysis of a single-source precursor in miniemulsion
- D. Stodt, H. Noei, C. Hättig, Y. Wang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 466-472. A combined experimental and computational study on the adsorption and reactions of NO on rutile TiO₂
- T. Alammar, H. Noei, Y. Wang, A.-V. Mudring, *Nanoscale* **5** (2013) 8045-8050. Mild yet phase-selective preparation of TiO₂ nanoparticles from ionic liquids-a critical
- H. Noei, F. Gallino, L. Jin, J. Zhao, C. Di Valentin, Y. Wang, *Angew. Chem.* **125** (2013) 2031-2035, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 1977-1981. Coverage-induced hydrogen transfer on ZnO surfaces: from ideal to real systems.
- H. Noei, O. Kozachuk, S. Amirjalayer, S. Bureekaew, M. Kauer, R. Schmid, B. Marler, M. Muhler, R. Fischer, Y. Wang, *J. Phys. Chem. C* **117** (2013) 5658-5666. CO adsorption on a mixed-valence ruthenium metal-organic framework studied by UHV-FTIR spectroscopy and DFT calculations
- M. Farnesi Camellone, J. Zhao, L. Jin, Y. Wang, M. Muhler, D. Marx, *Angew. Chem.* **125** (2013) 5892-5896, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 5780-5784. Molecular understanding of reactivity and selectivity for methanol oxidation at the Au/TiO₂ interface
- H. Noei, L. Jin, H. Qiu, M. Xu, Y. Gao, M. Kauer, Ch. Wöll, M. Muhler, Y. Wang, *Phys. Status Solidi B* **250** (2013) 1204-1221. Vibrational spectroscopic studies on pure and metal-covered metal oxide surfaces
- M. Ma, H. Noei, B. Mienert, J. Niesel, E. Bill, M. Muhler, R. A. Fischer, Y. Wang, U. Schatzschneider, N. Metzler-Nolte, *Chem. Eur. J.* **19** (2013) 6785-6790. Iron metal-organic frameworks MIL-88B and NH₂-MIL-88B for the loading and delivery of the gasotransmitter carbon monoxide

Physikalische Chemie 2

- Patra, T.Q. Luong, R.K. Mitra, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**(3) (2013) 930-939. Solvent dynamics in reverse micellar water-pool: A spectroscopic investigation of DDAB/cyclohexane/water systems.
- K. Meister, S. Ebbinghaus, Y. Xu, J.G. Duman, A. DeVries, M. Gruebele, D.M. Leitner, M. Havenith, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **110**(5) (2013) 1617-1622. Long-range protein-water dynamics in hyperactive insect antifreeze proteins.
- B. Born, M. Heyden, M. Grossman, I. Sagi, M. Havenith, *Proceedings of SPIE* (2013) 85850E/1-85850E/7. Protein-water network dynamics during metalloenzyme hydrolysis observed by kinetic THz absorption (KITA).
- V. Sharma, F. Böhm, M. Seitz, G. Schwaab, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**(21) (2013) 8383-8391. From solvated ions to ion-pairing: A THz study of lanthanum (III) hydration.
- J.-W. Lackmann, S. Schneider, E. Edengeiser, F. Jarzina, S. Brinkmann, E. Steinborn, M. Havenith, J. Benedikt, J. Bandow, *J. R. Soc. Interface* **10**(89) (2013) 20130591/1-12. Photons and particles emitted from cold atmospheric-pressure plasma inactivate bacteria and biomolecules independently and synergistically.

- M. Letzner, S. Grün, D. Habig, K. Hanke, T. Endres, P. Nieto, G. Schwaab, Ł. Walewski, M. Wollenhaupt, H. Forbert, D. Marx, M. Havenith, *J. Chem. Phys.* **139**(15) (2013) 154304/1-11. High resolution spectroscopy of HCl–water clusters: IR bands of undissociated and dissociated clusters.
- S. Baldus, M. Mischo, M. Havenith, P. Awakowicz, Plasma Science (ICOPS), (2013) Abstracts IEEE International Conference on Digital Object Identifier: 10.1109/PLASMA.2013.6633305 (2013) 1. IEEE Conference Publications. Analyzing the interactions between a DBD and skin components using Raman microspectroscopy.
- E. Bründermann, D.A. Schmidt, B. Gasharova, Y.-L. Mathis, D. Moss, J. Steinmann, E. Edengeiser, M. Mischo, M. Havenith, *Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz)* (2013) 38th International Conference on Digital Object Identifier: 10.1109/IRMMW-THz.2013.6665734 (2013) 1-2. IEEE Conference Publications. The ANKA-IR2 nanoscope and micro- and nanospectroscopy applications.
- C.W. Müller, *GIT Labor-Fachzeitschrift* **5** (2013) 291–293. Einzelkonformations-spektroskopie
- H. Weingärtner, *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.* **18** (2013) 183-189. NMR Studies of Ionic Liquids: Structure and Dynamics
- S. Gabl, O. Steinhauser, H. Weingärtner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 9242-9246. From Short-range to Long-range Intermolecular NOEs in Ionic Liquids: Frequency Does Matter

Analytische Chemie

- M. N. Zafar, M. Shao, R. Ludwig, D. Leech, W. Schuhmann, L. Gorton, *ECS Trans.* **53** (2013) 131-143. Improving the current density and the coulombic efficiency by a cascade reaction of glucose oxidizing enzymes
- C. Khare, K. Sliozberg, R. Meyer, A. Savan, W. Schuhmann, A. Ludwig, *Int. J. Hydrogen Energ.* **38** (2013) 15954-15964. Layered WO₃/TiO₂ nanostructures with enhanced photocurrent densities
- E. Ventosa, B. Mei, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, *ChemSusChem* **6** (2013) 1312-1315. TiO₂(B)/anatase composites synthesized by spray drying as high performance negative electrode material in Li-ion batteries
- A. Zhao, J. Masa, W. Schuhmann, W. Xia, *J. Phys. Chem. C* **117** (2013) 24283-24291. Activation and stabilization of nitrogen-doped CNTs as electrocatalysts in the oxygen reduction reaction at strongly alkaline conditions
- T. Kothe, N. Plumeré, A. Badura, M. M. Nowaczyk, D. A. Guschin, M. Rögner, W. Schuhmann, *Angew. Chem.* **125** (2013) 14483-14486. Die Kombination einer auf Photosystem 1 basierenden Photokathode und einer auf Photosystem 2 basierenden Photoanode zu einem Z-Schema-Analogon für biophotovoltaische Anwendungen. *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 14233-14236. A Photosystem 1 based photocathode and a Photosystem 2 based photoanode combined to a Z-scheme-mimic for biophotovoltaics.
- M. Nebel, S. Grützke, N. Diab, A. Schulte, W. Schuhmann, *Faraday Disc.*, **164** (2013) 19-32. Microelectrochemical visualization of oxygen consumption of single living cells

- J. B. Henry, A. Maljusch, J. Tymoczko, W. Schuhmann, A. S. Bondarenko, *Electrochim. Acta* **112** (2013) 887-893. Preparation of thin film Cu-Pt(111) near-surface alloys: one small step towards up-scaling model single crystal surfaces
- J. Masa, K. Ozoemena, W. Schuhmann, J. H. Zagal, in "Electrocatalysis in Fuel Cells. A Non and Low Platinum Approach". *Lecture Notes in Energy*, **Vol. 9** (M. Shao, ed.), Springer, 2013, pp 157-212. Fundamental studies on the electrocatalytic properties of metal macrocyclics and other complexes for the electroreduction of O₂. (http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-1-4471-4911-8_7)
- A. Badalyan, E. G. Yoga, V. Schwuchow, S. Pöller, W. Schuhmann, S. Leimkühler, U. Wollenberger, *Electrochem. Commun.* **37** (2013) 5-7. Analysis of the interaction of the molybdenum hydroxylase PaoABC from Escherichia coli with positively and negatively charged metal complexes.
- S. Pöller, M. Shao, C. Sygmund, R. Ludwig, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **110** (2013) 152–158. Low potential biofuel cell anodes based on redox polymers with covalently bound phenothiazine derivatives for wiring FAD-dependent enzymes
- M. Huang, A. Maljusch, F. Calle-Vallejo, J.B. Henry, M.T.M. Koper, W. Schuhmann, A.S. Bandarenka, *RSC Adv.* **44** (2013) 21648-21654. Electrochemical formation and surface characterisation of Cu_{2-x}Te thin films with adjustable content of Cu
- T. Chikka Nagaiah, D. Schäfer, W. Schuhmann, N. Dimcheva, *Anal. Chem.* **85** (2013) 7897-7903. Electrochemically deposited Pd-Pt and Pd-Au co-deposits on graphite electrodes for electrocatalytic H₂O₂ reduction
- E. Ventosa, W. Xia, S. Klink, F. La Mantia, B. Mei, M. Muhler, W. Schuhmann, *Chem. Eur. J.* **19** (2013) 14194-14199. Ammonia-annealed TiO₂ as negative electrode material in Li-ion batteries: N-doping or oxygen deficiency?
- A. Sode, M. Nebel, P. Pinyou, S. Schmaderer, J. Szeponik, N. Plumeré, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **25** (2013) 2084-2091. Determination of temperature gradients with micrometric resolution by local open circuit potential measurements at a scanning ultramicroelectrode
- G. Zampardi, E. Ventosa, F. La Mantia, W. Schuhmann, *Chem. Comm.* **49** (2013) 9347-9349. In-situ visualization of Li-ion intercalation and formation of the solid electrolyte interphase on TiO₂ based paste electrodes using scanning electrochemical microscopy
- Z. Sun, S. Pöller, X. Huang, D. Guschin, C. Taetz, P. Ebbinghaus, J. Masa, A. Erbe, A. Kilzer, W. Schuhmann, M. Muhler, *Carbon* **64** (2013) 288-294. High-yield exfoliation of graphite in acrylate polymers: a stable few-layer graphene nanofluid with enhanced thermal conductivity.
- S. Pöller, D. Koster, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **34** (2013) 327-330. Stabilizing redox polymer films by electrochemically induced crosslinking.
- Z. Sun, N. Dong, K. Wang, D. König, T. Chikka Nagaiah, M. D. Sánchez, A. Ludwig, X. Cheng, W. Schuhmann, J. Wang, M. Muhler, *Carbon* **62** (2013) 182-192. Ag-stabilized few-layer graphene dispersions in low boiling point solvents for versatile nonlinear optical applications
- M. Shao, M. Nadeem Zafar, M. Falk, R. Ludwig, C. Sygmund, C. K. Peterbauer, D. A. Guschin, D. Leech, S. Shleev, W. Schuhmann, L. Gorton, *ChemPhysChem* **13** (2013) 2260-2269. Optimization of a membrane-less glucose/oxygen enzymatic biofuel cell based on a bioanode with high coulombic efficiency and current density

- M. Gebala, F. La Mantia, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **13** (2013) 2208-2216. Kinetic and thermodynamic hysteresis imposed by intercalation of proflavine in ferrocene-modified double stranded DNA
- L. Stratmann, M. Gebala, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **13** (2013) 2198-2207. A chemical lift-off process. Removing non-specific adsorption in an electrochemical Epstein-Barr-Virus immunoassay
- J. Masa, W. Schuhmann, *Chem. Eur. J.* **29** (2013) 9644-9654. Systematic selection of metalloporphyrin based catalysts for oxygen reduction by modulation of the donor-acceptor intermolecular hardness
- J. Tymoczko, W. Schuhmann, A. Bandarenka, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 12998-13004. A versatile electrochemical cell for the preparation and characterisation of model electrocatalytic systems.
- Z. Sun, N. Dong, K. Xie, W. Xia, D. König, T. Nagaiah, M. Sánchez, P. Ebbinghaus, A. Erbe, X. Zhang, A. Ludwig, W. Schuhmann, J. Wang, M. Muhler, *J. Phys. Chem. C*, **117** (2013) 11811-11817. Nanostructured few-layer graphene with superior optical limiting properties fabricated by a catalytic steam etching process
- Y. M. Temerk, M. S. Ibrahim, M. Kotb, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **25** (2013) 1381-1387. Renewable pencil electrodes for highly sensitive anodic stripping voltammetric determination of 3-hydroxyflavone and Morin in bulk form and in biological fluids
- A. Vasilescu, W. Schuhmann, S. Gáspár, "Detection Challenges in Clinical Diagnostics" (P. Vadgama, S. Petcu; eds.), *RSC Cambridge*, 2013, ISBN: 978-1-84973-612-1. Chapter 4. Recent progress in the electrochemical detection of disease-related biomarkers. pp. 89-128.
- J. Masa, A. Zhao, W. Xia, Z. Sun, B. Mei, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electrochem. Comm.* **34** (2013) 113-116. Trace metal residues promote the activity of supposedly metal-free nitrogen-modified carbon catalysts for the oxygen reduction reaction
- S. Intarakamhang, W. Schuhmann, A. Schulte, *J. Solid. State Electrochem.* **17** (2013) 1535-1542. Robotic heavy metal anodic stripping voltammetry: ease and efficacy for trace lead and cadmium electroanalysis.
- M. Nebel, S. Grützke, N. Diab, A. Schulte, W. Schuhmann, *Angew. Chem.* **125** (2013) 6460-6463. Visualisierung des O₂-Verbrauchs einzelner lebender Zellen mithilfe elektrochemischer Rastermikroskopie: der Einfluss der faradayschen Sondenreaktion. *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 6335-6338. Visualization of oxygen consumption of single living cells by means of 4D shearforce-based constant-distance mode SECM: The influence of the tip reaction
- S. Klink, D. Höche, F. La Mantia, W. Schuhmann, *J. Power Sources*, **240** (2013) 273-280. FEM modelling of a coaxial three-electrode test cell for electrochemical impedance spectroscopy in lithium ion batteries
- A. Zhao, J. Masa, M. Muhler, W. Schuhmann, W. Xia, *Electrochim. Acta* **98** (2013) 139-145. N-doped carbon synthesized from N-containing polymers as metal-free catalysts for the oxygen reduction under alkaline conditions.
- D. Schäfer, A. Puschhof, W. Schuhmann, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 5215-5223. Electrochemical microscopy at variable temperatures
- A. S. Bandarenka, K. Eckhard, A. Maljusch, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **85** (2013) 2443-2448. Localized electrochemical impedance spectroscopy: visualization of spatial distributions of the key parameters describing solid / liquid interfaces

- S. J. Kim, K. Xu, H. Parala, R. Beranek, M. Bledowski, K. Sliozberg, H.-W. Becker, D. Rogalla, D. Barreca, C. Maccato, C. Sada, W. Schuhmann, R. A. Fischer, A. Devi, *Chem. Vap. Dep.* **19** (2013) 45-52. Intrinsic nitrogen-doped CVD-grown TiO₂ thin films from all-N-coordinated Ti precursors for photoelectrochemical applications.
- Y. M. Temerk, M. S. Ibrahim, M. Kotb, W. Schuhmann, *Anal. Bioanal. Chem.* **405** (2013) 3839-3846. Interaction of antitumor flavonoids with ds-DNA in the absence and presence of Cu(II)
- N. Glithero, C. Clark, L. Gorton, W. Schuhmann, N. Pasco, *Anal. Bioanal. Chem.* **405** (2013) 3791-3799. At-line measurement of lactose in dairy processing plants
- P. Ó Conghaile, S. Pöller, D. MacAodha, W. Schuhmann, D. Leech, *Biosens. Bioelectron.* **43** (2013) 30-37. Coupling osmium complexes to epoxy-functionalised polymers to provide mediated enzyme electrodes for glucose oxidation in physiological conditions
- M. Shao, S. Pöller, R. Ludwig, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **29** (2013) 59-62. A low-potential glucose biofuel cell anode based on a novel toluidine blue modified redox polymer and the flavodehydrogenase domain of cellobiose dehydrogenase
- R. Haddad, W. Xia, D. A. Guschin, S. Pöller, M. Shao, J. Vivekananthan, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **25** (2013) 59-67. Carbon cloth/carbon nanotube electrodes for biofuel cells development
- U. Salaj-Kosla, S. Pöller, W. Schuhmann, S. Shleev, E. Magner, *Bioelectrochem.* **91** (2013) 15-20. Direct electron transfer of *Trametes hirsuta* laccase adsorbed at unmodified nanoporous gold electrodes.
- M. Nebel, S. Neugebauer, K. Eckhard, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **27** (2013) 160-163. Ring-disk microelectrodes for simultaneous constant-distance and constant-current mode scanning electrochemical microscopy
- J. Tymoczko, W. Schuhmann, A. S. Bandarenka, *Electrochem. Commun.* **27** (2013) 42-45. The constant phase element reveals 2D phase transitions in adsorbate layers at the electrode/electrolyte interfaces
- A. Dobrzeniecka, A. Zeradjanin, J. Masa, A. Puschhof, J. Stroka, P. J. Kulesza, W. Schuhmann, *Catal. Today* **202** (2013) 55-62. Application of SECM in tracing of hydrogen peroxide at multicomponent non-noble electrocatalyst films for the oxygen reduction reaction
- M. Shao, M. N. Zafar, D. A. Guschin, R. Ludwig, C. K. Peterbauer, W. Schuhmann, L. Gorton, *Biosens. Bioelectron.* **40** (2013) 308-314. Mutual enhancement of the current density and the coulombic efficiency for a bioanode by entrapping bi-enzymes with Os-complex modified electrodeposition paints.
- M.P. Arpa-Sancet, M. Hanke, Z. Wang, S. Bauer, C. Azucena, H.K. Arslan, M. Heinle, H. Gliemann, C. Wöll, A. Rosenhahn, *Biointerphases* **8** (2013) 29. Surface anchored metal-organic frameworks as stimulus responsive antifouling coatings
- L. Xiao, J. Li, S. Mieszkina, A. Fino, A.S. Clare, M.E. Callow, J.A. Callow, M. Grunze, A. Rosenhahn, P. Levkin, *ACS Applied Materials & Interfaces* **5** (2013) 20,10074-10080. Liquid-infused slippery surfaces show marine anti-biofouling properties
- C. Christophis, E.A. Cavalcanti-Adam, M. Hanke, Kenji Kitamura, A. Gruverman, M. Grunze, P. Dowben, A. Rosenhahn, *Biointerphases* **8** (2013) 27. Adherent cells avoid polarization gradients on periodically poled LiTaO₃ ferroelectrics

- M. Zamfir, C. Rodriguez-Emmenegger, S. Bauer, L. Barner, A. Rosenhahn, C. Barner-Kowollik, *J. Mater. Chem. B* **1** (2013) 6027-6034. Controlled growth of protein resistant PHEMA brushes via S -RAFT polymerization
- D.D. Mai, J. Hallmann, T. Reusch, M. Osterhoff, S. Düsterer, R. Treusch, A. Singer, M. Beckers, T. Gorniak, T. Senkbeil, R. Dronyak, J. Gulden, O.M. Yefanov, A. Al-Shemmary, A. Rosenhahn, A.P. Mancuso, I.A. Vartanyants, and T. Salditt, *Optics Express* **21** (2013) 11, 13006-13017. Single pulse coherence measurements in the water window at the free electron laser FLASH
- S. Bauer, M.P. Arpa-Sancet, J.A. Finlay, M.E. Callow, J.A. Callow, A. Rosenhahn, *Langmuir* **29** (2013) 4039-4047. Adhesion of marine fouling organisms on hydrophilic and amphiphilic polysaccharides
- M. Beckers, T. Senkbeil, T. Gorniak, K. Giewekemeyer, T. Salditt, A. Rosenhahn, *Ultramicroscopy* **126** (2013) 44-47. Drift Correction in Ptychographic Diffractive Imaging
- L. Xiao, S. Thompson, M. Röhrig, M.E. Callow, J.A. Callow, M. Grunze, A. Rosenhahn *Langmuir* **29** (2013) 1093–1099. Hot embossed microtopographic gradients reveal morphological cues that guide the settlement of zoospores
- K. Steinke, F. Sachse, N. Ettischer, N. Strutz-Seeböhm, U. Henrion, M. Rohrbeck, R. Klosowski, D. Wolters, S. Brunner, W.-M. Franz et al. *The FASEB Journal* **27** (2013) 4108–4121. Coxsackievirus B3 modulates cardiac ion channels.
- C. Krisp, F. Jacobsen, M. J. McKay, M. P. Molloy, L. Steinstraesser, D. A. Wolters. *Proteomics* **13** (2013) 2670–2681. Proteome analysis reveals antiangiogenic environments in chronic wounds of diabetes mellitus type 2 patients.
- J. Jacobs, C. Marx, V. Kock, O. Reifschneider, B. Franzel, C. Krisp, D. Wolters, U. Kuck. *Molecular & Cellular Proteomics* **12** (2013) 1912–1925. Identification of a Chloroplast Ribonucleoprotein Complex Containing Trans-splicing Factors, Intron RNA, and Novel Components.
- U. Haußmann, D. A. Wolters, B. Fränzel, L. D. Eltis, A. Poetsch. *J. Proteome Res.* **12** (2013) 1188–1198. Physiological Adaptation of the *Rhodococcus jostii* RHA1 Membrane Proteome to Steroids as Growth Substrates.
- N. Plumeré, *Anal. Bioanal. Chem.*, **405** (2013) 3731-3738. Interferences from oxygen reduction reactions in bioelectroanalytical measurements: the case study of nitrate and nitrite biosensors.
- W. H. Campbell, J. Henig, N. Plumeré, *Bioelectrochem.*, **93** (2013) 46-50. Affinity binding via Zinc(II) for controlled orientation and electrochemistry of Histidine-tagged nitrate reductase in self-assembled monolayers,.
- M. Fan, F. La Mantia, *Electrochem. Comm.* **37** (2013) 91-95. Effect of surface topography on the anodization of titanium.
- U. Preiss, E. Borukhovich, N. Alemayehu, I. Steinbach, F. La Mantia, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **111** (2013) 074006. A permeation model for the electrochemical interface.
- F. Di Quarto, F. Di Franco, M. Santamaria, F. La Mantia, C. Rangel, A.I. de Sá, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **2** (2013) N205-N210. Dielectric properties of Al-Nb amorphous mixed oxides.
- A. Battistel, F. La Mantia, *Anal. Chem.* **85** (2013) 6799-6805. Non-linear analysis: the intermodulated differential immittance spectroscopy.

- D. Wiedenmann, L. Keller, L. Holzer, J. Stojadinović, B. Münch, L. Suarez, B. Fumey, H. Hagendorfer, R. Brönnimann, P. Modregger, M. Gorbar, U.F. Vogt, A. Züttel, F. La Mantia, R. Wepf, B. Grobety, *AIChE Journal* **59** (2013) 1446-1457. 3D pore structure and ion conductivity of porous ceramic diaphragms.
- F. La Mantia, C.D. Wessells, H.D. Deshazer, Y. Cui, *Electrochem. Comm.* **31** (2013) 141-144. Reliable reference electrodes for lithium-ion batteries.
- F. La Mantia, R.A. Huggins, Y. Cui, *J. Appl. Electrochem.* **43** (2013) 1-7. Oxidation processes on conducting carbon additives for lithium-ion batteries.
- F. Calle-Vallejo, M.T.M. Koper, A.S. Bandarenka. *Chem. Soc. Rev.* **42** (2013) 5210-5230. Tailoring the catalytic activity of electrodes with monolayer amounts of foreign metals.
- A.S. Bandarenka. *Analyst* **138** (2013) 5540-5554. Exploring the interfaces between metal electrodes and aqueous electrolytes with electrochemical impedance spectroscopy.
- A.S. Bandarenka, M.T.M. Koper. *J. Catal.* **308** (2013) 11-24. Structural and electronic effects in heterogeneous electrocatalysis: towards a rational design of electrocatalysts.
- M. Kokoschka, J.B. Henry, A.S. Bandarenka. *Langmuir* **29** (2013) 9909–9917. Multiparametric characterisation of non-electroactive self-assembled monolayers during their formation.
- F. Calle-Vallejo, M. Huang, J.B. Henry, M.T.M. Koper, A.S. Bandarenka. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 3196-3202. Theoretical Design and Experimental Implementation of Ag/Au Electrodes for the Electrochemical Reduction of Nitrate.
- B. Sanchez, A.S. Bandarenka, G. Vandersten, J. Schoukens, R. Bragos. *Med. Eng. & Phys.* **35** (2013) 1349-1357. Novel approach for processing electrical bioimpedance spectra using differential impedance analysis.
- 12. A.S. Bandarenka, Development of hybrid algorithms for EIS data fitting, a book chapter in: *Lecture Notes on Impedance Spectroscopy. Measurement, Modeling and Applications*, **4** / Ed. Kanoun, O. -CRC Press, Taylor and Francis Group, London, 2013, pp. 29-36.

Theoretische Chemie

- Special Issue: V. Staemmler, C. Hättig, D. Marx (Guest Editors), Special Issue in Honour of Professor Kutzelnigg, *Mol. Phys. Volume 111* Issues 16-17, Pages 2375-2662 (2013)
- Review Article: S. D. Ivanov, A. Witt, D. Marx, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 10270-10299 (2013). Theoretical spectroscopy using molecular dynamics: theory and application to CH₅⁺ and its isotopologues
- Review Article: J. Frenzel, J. Kiss, N. N. Nair, B. Meyer, D. Marx, *Phys. Status Solidi B* **250** (2013) 1174—1190. Methanol synthesis on ZnO from molecular dynamics
- M. Letzner, S. Grün, D. Habig, K. Hanke, T. Endres, P. Nieto, G. Schwaab, L. Walewski, M. Wollenhaupt, H. Forbert, D. Marx, M. Havenith, *J. Chem. Phys.* **139** 154304-1-11. High resolution spectroscopy of HCl-water clusters: IR bands of undissociated and dissociated clusters revisited
- L. Walewski, H. Forbert, D. Marx, *Mol. Phys.* **111** (2013) 2555-2569. Interaction-induced localization of protons in hydrogen bonds at superfluid helium temperatures

- P. Seema, J. Behler, D. Marx, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 16001—16011. Force-induced mechanical response of molecule--metal interfaces: molecular nanomechanics of propanethiolate self-assembled monolayers on Au(111)
- M. Böckmann, S. Braun, N. L. Doltsinis, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **139** (2013) 084108-1-10. Mimicking photoisomerisation of azo-materials by a force field switch derived from nonadiabatic ab initio simulations: Application to photoswitchable helical foldamers in solution
- D. Munoz-Santiburcio, C. Wittekindt D. Marx, *Nat. Commun.* **4** (2013) 2349-1-5. Nanoconfinement effects on hydrated excess protons in layered materials
- J. Kiss, J. Frenzel, B. Meyer, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **139** (2013) 044705-1-1. Methanol synthesis on ZnO(0001).II. Structure, energetics, and vibrational signature of reaction intermediates
- P. Dopieralski, J. Ribas-Arino, P. Anjukandi, M. Krupicka, J. Kiss, D. Marx, *Nat. Chem.* **5** (2013) 685-691. The Janus-faced role of external forces in mechanochemical disulfide bond cleavage
- M. Smiechowski, H. Forbert, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **139** (2013) 014506-1-15. Spatial decomposition and assignment of infrared spectra of simple ions in water from mid-infrared to THz frequencies: Li+(aq) and F-(aq)
- M. Farnesi Camellone, J. Zhao, L. Jin, Y. Wang, M. Muhler, D. Marx, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 5780—5784. Molecular Understanding of Reactivity and Selectivity for Methanol Oxidation at the Au/TiO₂ Interface
- L. Walewski, H. Forbert, D. Marx, *ChemPhysChem* **14** (2013) 817-826. Revealing the Subtle Interplay of Thermal and Quantum Fluctuation Effects on Contact Ion Pairing in Microsolvated HCl
- A. Witt, S. D. Ivanov, D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **110** (2013) 083003-1-5. Microsolvation-Induced Quantum Localization in Protonated Methane
- L. Martinez-Suarez, J. Frenzel, D. Marx, B. Meyer, *Phys. Rev. Lett.* **110** (2013) 086108-1-5. Tuning the Reactivity of a Cu/ZnO Nanocatalyst via Gas Phase Pressure
- P. Seema, J. Behler, D. Marx, *J. Phys. Chem. C* **117** (2013) 337-348. Adsorption of Methanethiolate and Atomic Sulfur at the Cu(111) Surface: A Computational Study
- M. Farnesi Camellone D. Marx, *J. Phys. Chem. Lett.* **4** (2013) 514-518. On the Impact of Solvation on a Au/TiO₂ Nanocatalyst in Contact with Water
- N. Artrith, B. Hiller, J. Behler, *Phys. Status Solidi B* **250** (2013) 1191-1203. Neural Network Potentials for Metals and Oxides - First Applications to Copper Clusters at Zinc Oxide
- T. Morawietz, J. Behler, *J. Phys. Chem. A* **117** (2013) 7356-7366. A Density-Functional Theory Based Neural Network Potential for Water Clusters Including van der Waals Corrections
- T. Morawietz, J. Behler, *Z. Phys. Chem.* **227** (2013) 1559-1581. A Full-Dimensional Neural Network Potential-Energy Surface for Water Clusters up to the Hexamer
- G. C. Sosso, G. Miceli, S. Caravati, F. Gilberti, J. Behler, and M. Bernasconi, *J. Phys. Chem. Lett.* **4** (2013) 4241-4246. Fast Crystallization of the Phase Change Compound GeTe by Large Scale Molecular Dynamics Simulations
- D. Stodt, H. Noei, C. Hättig, C. Y. Wang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 446-472. A combined experimental and computational study on the adsorption and reactions of NO on rutile TiO₂

- D. Frieze, C. Hättig, J. Koßmann, *J. Chem. Theor. Comput.* **9** (2013) 1469-1480. Analytic molecular Hessian calculations for CC2 and MP2 combined with the resolution of the identity approximation.
- G. Schmitz, B. Helmich, C. Hättig, *Mol. Phys.* **15** (111) 2463-2472. A $O(N^3)$ scaling PNO-MP2 method using a hybrid OSV-PNO approach with an iterative direct generation of OSVs.
- K. Sneskov, J. M. H. Olsen, T. Schwabe, C. Hättig, O. Christiansen, J. Kongsted, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 7567-7576. Computational screening of one- and two-photon spectrally tuned channelrhodopsin mutants.
- F. Furche, R. Ahlrichs, C. Hättig, W. Klopper, M. Sierka, F. Weigend, *WIREs Comput. Mol. Sci.* (2013) doi:10.1002/wcms.1162. TURBOMOLE
- K. Aidas, C. Angeli, K. Bak, V. Bakken, L. Boman, O. Christiansen, R. Cimiraglia, S. Coriani, P. Dahle, E. Dalskov, U. Ekstrøm, T. Enevoldsen, J. Eriksen, P. Ettenhuber, B. Fernandez, L. Ferrighi, H. Fliegl, L. Frediani, E. Fromager, K. Hald, A. Halkier, C. Hättig, H. Heiberg, T. Helgaker, A. C. Hennum, H. Hettema, S. Høst, I.-M. Høyvik, B. Jansik, H. J. Jensen, D. Jonsson, P. Jørgensen, J. Kauczor, S. Kirpekar, T. Kjærgaard, W. Klopper, S. Knecht, R. Kobayashi, J. Kongsted, H. Koch, A. Krapp, K. Kristensen, A. Ligabue, O. Lutnæs, J. Melo, K. Mikkelsen, C. Neiss, C. Nielsen, P. Norman, J. Olsen, J. M. Olsen, A. Osted, M. Packer, F. Pawłowski, T. B. Pedersen, P. Provasi, S. Reine, Z. Rinkevicius, T. Ruden, K. Ruud, V. Rybkin, P. Salek, C. Samson, A. Sanchez de Meras, T. Saue, S. Sauer, B. Schimmelpfennig, K. Sneskov, A. Steindal, K. Sylvester-Hvid, P. Taylor, A. Teale, E. Tellgren, D. Tew, A. Thorvaldsen, O. Vahtras, M. Watson, D. Wilson, H. Ågren, *WIREs Comput. Mol. Sci.* (2013) doi:10.1002/wcms.1172. The DALTON quantum chemistry program system.
- B. Helmich, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **139** (2013) 084114. A pair natural orbital implementation of the coupled cluster model CC2 for excitation energies.
- N. O. C. Winter, N. K. Graf, S. Leutwyler, C. Hättig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 6623-6630. Benchmarks for 0-0 transitions of aromatic organic molecules: DFT/B3LYP, ADC(2), CC2, SOS-CC2 and SCS-CC2 compared to high-resolution gas-phase data.
- D. P. Tew, C. Hättig, *Int. J. Quant. Chem. S* **113** (2013) 224-229. Pair natural orbitals in explicitly correlated second-order Møller-Plesset theory.
- Md. E. Ali, V. Staemmler, F. Illas, P. M. Oppeneer, *J. Chem. Theory Comput.*, **9** (2013) 5216-5220. Designing the redox-driven switching of ferro- to antiferromagnetic couplings in organic diradicals.
- K. Fink, V. Staemmler, *Mol. Phys.*, **111** (2013) 2594-2605. A modified CAS-CI approach for an efficient calculation of magnetic exchange coupling constants.
- J. Pospech, I. Fleischer, R. Franke, S. Buchholz, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **52**, (2013), 2852-2872. Alternative Metals for Homogeneous Catalyzed Hydroformylation Reactions
- I. Fleischer, K. M. Dyballa, R. Jennerjahn, R. Jackstell, R. Franke, A. Spannenberg, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **52**, (2013), 2949-2953. From Olefins to Alcohols: Efficient and Regioselective Ruthenium-Catalyzed Domino Hydroformylation/Reduction Sequence
- I. Fleischer, R. Jennerjahn, D. Cozzula, R. Jackstell, R. Franke, M. Beller, *ChemSusChem*, **6**, (2013), 417-420. A Unique Palladium Catalyst for Efficient and Selective Alkoxy carbonylation of Olefins with Formates

- P. Rollbusch, M. Tuinier, M. Becker, M. Ludwig, M. Grünewald, R. Franke, *Chem. Ing. Tech.*, **85**, (2013), 1107-1111. Hydrodynamik in Hochdruckblasensäulen
- P. Rollbusch, M. Tuinier, M. Becker, M. Ludwig, M. Grünewald, R. Franke, *Chem. Eng. Technol.*, **36**, (2013), 1603-1607. Hydrodynamics of High Pressure Bubble Columns
- M. Becker, M. Tuinier, P. Rollbusch, M. Ludwig, R. Franke, M. Grünewald, M. Schlüter, *Chem. Ing. Tech.*, **85**, (2013), 989-991. BMBF-Projekt „Multi-Phase“
- I. Fleischer, L. Wu, I. Profir, R. Jackstell, R. Franke, M. Beller, *Chem. Eur. J.*, **19**, (2013), 10589-10594. Towards the Development of a Selective Ruthenium-Catalyzed Hydroformylation of Olefins
- A. Schönweiz, J. Debuschewitz, S. Walter, R. Wölfel, H. Hahn, K. M. Dyballa, R. Franke, M. Haumann, P. Wasserscheid, *ChemCatChem*, **5**, (2013), 2955-2963. Ligand-Modified Rhodium Catalysts on Porous Silica in the Continuous Gas-Phase Hydroformylation of Short-Chain Alkenes - Catalytic Reaction in Liquid-Supported Aldol Products
- N. V. Dubrovina, L. Domke, I. A. Shuklov, A. Spannenberg, R. Franke, A. Villinger, A. Börner, *Tetrahedron*, **69**, (2013), 8809-8817. New mono- and bidentate P-ligands using one-pot click-chemistry: synthesis and application in Rh-catalyzed hydroformylation
- M. Becker, R. Franke, F. Stenger, *chemie anlagen verfahren*, **11**, (2013), 48-49. 3:0 für das Kleinformat
- R. Franke, B. Hamers, F. Stenger, M. Becker, *Chemistry Today*, **31**, (2013), 26-29. Intensified production concepts for speciality chemicals in emerging markets
- R. Franke, A. Börner, in: *75 Jahre Oxo-Synthese, 75 Years of Oxo Synthesis*, G. Frey, G. Dämbkes, (Eds.), pp 261-294, Klartext Verlag, Essen, 2013. Hydroformylation — State of the art and perspectives
- L. Wu, I. Fleischer, R. Jackstell, I. Profir, R. Franke, M. Beller, *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, (2013), 14306-14312. Ruthenium-Catalyzed Hydroformylation/Reduction of Olefins to Alcohols: Extending the Scope to Internal Alkenes
- W. Kutzelnigg, *Int. J. Quantum Chem.* **113** (2013) 203. Expansion of a wave function in a Gaussian basis. I. Local vs. global approximation
- T. A. Wassenaar, H. I. Ingolfsson, M. Prieß, S.J. Marrink, L. V. Schäfer, *J. Phys. Chem. B* **117** (2013) 3516-3530. Mixing Martini: Electrostatic Coupling in Hybrid Atomistic/Coarse-Grained Biomolecular Simulations
- P. Lloris-Garcera, J. S. Slusky, S. Seppälä, M. Prieß, L. V. Schäfer, G. von Heijne, *J. Mol. Biol.* **425** (2013) 4642-4651. In vivo Trp-scanning of the Small Multidrug Resistance protein EmrE confirms 3D structure models
- M. Majsnerowska, I. Hänel, D. Wunnicke, L. V. Schäfer, H.-J. Steinhoff, D. J. Slotboom, *Structure* **21** (2013) 861-867. Substrate-induced conformational changes in the S-component ThiT from an Energy Coupling Factor Transporter
- D. H. de Jong, G. Singh, W. F. D. Bennett, C. Arnarez, T. A. Wassenaar, L. V. Schäfer, X. Periole, D. P. Tieleman, and S. J. Marrink, *J. Chem. Theory Comput.* **9** (2013) 687-697. Improved Parameters for the Martini Coarse-Grained Protein Force Field

Technische Chemie

- R. Haddad, W. Xia, D.A. Guschin, S. Pöller, M. Shao, J. Vivekananthan, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electroanal.* **25** (2013) 59-67. Carbon Cloth/Carbon Nanotube Electrodes for Biofuel Cells Development
- M. Behrens, G. Lolli, N. Muratova, I. Kasatkin, M. Hävecker, R. Naumann d'Alnoncourt, O. Storcheva, K. Köhler, M. Muhler, R. Schlögl, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 1374-1381. The effect of Al-doping on ZnO nanoparticles applied as catalyst support
- C.M. Farnesi, J. Zhao, L. Jin, Y. Wang, M. Muhler, D. Marx, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 5780-5784. Molecular Understanding of Reactivity and Selectivity for Methanol Oxidation at the Au/TiO₂ Interface
- P. Chen, L. Chew, A. Kostka, M. Muhler, W. Xia, *Catal. Sci. Technol.* **3** (2013) 1964-1971. The structural and electronic promoting effect of nitrogen-doped carbon nanotubes on supported Pd nanoparticles for selective olefin hydrogenation
- K. Kähler, M.C. Holz, M. Rohe, A.C. van Veen, M. Muhler, *J. Catal.* **299** (2013) 162-170. Methanol oxidation as probe reaction for active sites in Au/ZnO and Au/TiO₂ catalysts
- P. Chen, L. Chew, A. Kostka, K. Xie, M. Muhler, W. Xia, *J. of Energy Chem.* **22** (2013) 312-320. Purified oxygen- and nitrogen-modified multi-walled carbon nanotubes as metal-free catalysts for selective olefin hydrogenation
- J. Schartner, J. Güldenhaupt, B. Mei, M. Rögner, M. Muhler, K. Gerwert, C. Kötting, *J. Am. Chem. Soc.* **135** (2013) 479-487. Universal Method for Protein Immobilization on Chemically Functionalized Germanium Investigated by ATR-FTIR Difference Spectroscopy
- H. Noei, O. Kozachuk, S. Amirjalayer, S. Bureekaew, M. Kauer, R. Schmid, B. Marler, M. Muhler, R.A. Fischer, Y. Wang, *J. Phys. Chem. C* **117** (2013) 5658-5666. CO Adsorption on a Mixed-Valence Ruthenium Metal–Organic Framework Studied by UHV-FTIR Spectroscopy and DFT Calculations
- M. Pang, X. Wang, W. Xia, M. Muhler, C. Liang, *Ind. Eng. Chem. Res.* **52** (2013) 4564-4571. Mo(VI)–Melamine Hybrid As Single-Source Precursor to Pure-Phase β -Mo₂C for the Selective Hydrogenation of Naphthalene to Tetralin
- M. Ma, H. Noei, B. Mienert, J. Niesel, E. Bill, M. Muhler, R.A. Fischer, Y. Wang, U. Schatzschneider, N. Metzler-Nolte, *Chem. Eur. J.* **19** (2013) 6785-6790. Iron Metal-Organic Frameworks MIL-88B and NH₂-MIL-88B for the Loading and Delivery of the Gasotransmitter Carbon Monoxide
- A. Zhao, J. Masa, M. Muhler, W. Schuhmann, W. Xia, *Electrochim. Acta* **98** (2013) 139-145. N-doped carbon synthesized from N-containing polymers as metal-free catalysts for the oxygen reduction under alkaline conditions
- H. Noei, L. Jin, H. Qiu, M. Xu, Y. Gao, J. Zhao, M. Kauer, C. Woell, M. Muhler, Y. Wang, *Phys. Status Solidi A* **250** (2013) 1204-1221. Vibrational spectroscopic studies on pure and metal-covered metal oxide surfaces
- X. Iwanowa, J. Strunk, E. Löffler, M. Muhler, K. Merz, *Phys. Status Solidi A* **250** (2013) 1165-1173. Surface reaction of 2-propanol on modified Keggin type polyoxometalates: In situ IR spectroscopic investigation of the surface acid-base properties
- D. Heeskens, P. Aghaei, S. Kaluza, J. Strunk, M. Muhler, *Phys. Status Solidi A* **250** (2013) 1107-1118. Selective oxidation of ethanol in the liquid phase over Au/TiO₂

- M.C. Holz, K. Kähler, K. Tölle, A.C. van Veen, M. Muhler, *Phys. Status Solidi A* **250** (2013) 1094-1106. Gas-phase oxidation of 2-propanol over Au/TiO₂ catalysts to probe metal-support interactions
- W. Grünert, H. Gies, M. Muhler, S. Polarz, C.W. Lehmann, D. Grossmann, M. van den Berg, O.P. Tkachenko, A. De Toni, I. Sinev, M. Bandyopadhyay, V. Narkhede, A. Dreier, K.V. Klementiev, A. Birkner, E. Löffler, *Phys. Status Solidi A* **250** (2013) 1081-1093. Metal-supported catalysts encapsulated in mesoporous solids: Challenges and opportunities of a model concept
- A. Zychma, R. Wansing, V. Schott, U. Köhler, C. Wöll, M. Muhler, A. Birkner, *Phys. Status Solidi A* **250** (2013) 1071-1080. Elucidating elementary processes at Cu/ZnO interfaces: A microscopical approach
- Z. Sun, N. Dong, K. Xie, W. Xia, D. König, T.C. Nagaiah, M.D. Sanchez, P. Ebbinghaus, A. Erbe, X. Zhang, A. Ludwig, W. Schuhmann, J. Wang, M. Muhler, *J. Phys. Chem. C* **117** (2013) 11811-11817. Nanostructured Few-Layer Graphene with Superior Optical Limiting Properties Fabricated by a Catalytic Steam Etching Process
- M.J. Becker, W. Xia, K. Xie, A. Dittmer, K. Voelskow, T. Turek, M. Muhler, *Carbon* **58** (2013) 107-115. Separating the initial growth rate from the rate of deactivation in the growth kinetics of multi-walled carbon nanotubes from ethene over a cobalt-based bulk catalyst in a fixed-bed reactor
- F.E. Oropeza, B. Mei, I. Sinev, A.E. Becerikli, M. Muhler, J. Strunk, *Appl. Catal. B* **140** (2013) 51-59. Effect of Sn surface states on the photocatalytic activity of anatase TiO₂
- E. Ventosa, B. Mei, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, *ChemSusChem* **6** (2013) 1312-1315. TiO₂(B)/Anatase Composites Synthesized by Spray Drying as High Performance Negative Electrode Material in Li-Ion Batteries
- J. Masa, A. Zhao, W. Xia, Z. Sun, B. Mei, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electrochemistry Communications* **34** (2013) 113-116. Trace metal residues promote the activity of supposedly metal-free nitrogen-modified carbon catalysts for the oxygen reduction reaction
- Z. Shao, M. Pang, W. Xia, M. Muhler, C. Liang, *J. Energy Chem.* **22** (2013) 804-810. Creation of surface defects on carbon nanofibers by steam treatment
- Z. Sun, N. Dong, K. Wang, D. König, T.C. Nagaiah, M.D. Sanchez, A. Ludwig, X. Cheng, W. Schuhmann, J. Wang, M. Muhler, *Carbon* **62** (2013) 182-192. Ag-stabilized few-layer graphene dispersions in low boiling point solvents for versatile nonlinear optical applications
- B. Mei, H. Byford, M. Bledowski, L. Wang, J. Strunk, M. Muhler, R. Beranek, *Solar Energy Materials and Solar Cells* **117** (2013) 48-53. Beneficial effect of Nb doping on the photoelectrochemical properties of TiO₂ and TiO₂-polyheptazine hybrids
- R.W. Gosselink, W. Xia, M. Muhler, K.P. de Jong, J.H. Bitter, *ACS Catal.* **3** (2013) 2397-2402. Enhancing the Activity of Pd on Carbon Nanofibers for Deoxygenation of Amphiphilic Fatty Acid Molecules through Support Polarity
- K. Xie, M. Muhler, W. Xia, *Ind. Eng. Chem. Res* **52** (2013) 14081-14088. Influence of Water on the Initial Growth Rate of Carbon Nanotubes from Ethylene over a Cobalt-Based Catalyst
- E. Ventosa, W. Xia, S. Klink, F. La Mantia, B. Mei, M. Muhler, W. Schuhmann, *Chem. Eur. J.* **19** (2013) 14194-14199. Ammonia-Annealed TiO₂ and TiO₂ as a Negative Electrode Material in Li-Ion Batteries: N Doping or Oxygen Deficiency?

- Z. Sun, S. Pöller, X. Huang, D. Guschin, C. Taetz, P. Ebbinghaus, J. Masa, A. Erbe, A. Kilzer, W. Schuhmann, M. Muhler, *Carbon* **64** (2013) 288-294. High-yield exfoliation of graphite in acrylate polymers: A stable few-layer graphene nanofluid with enhanced thermal conductivity
- V. Schott, H. Oberhofer, A. Birkner, M. Xu, Y. Wang, M. Muhler, K. Reuter, C. Wöll, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 11925-11929. Chemical Activity of Thin Oxide Layers: Strong Interactions with the Support Yield a New Thin-Film Phase of ZnO
- B. Mei, C. Wiktor, S. Turner, A. Pougin, G. van Tendeloo, R. A. Fischer, M. Muhler, J. Strunk, *ACS Catal.* **3** (2013) 3041-3049. Evidence for Metal-Support Interactions in Au Modified TiO_x/SBA -15 Materials Prepared by Photodeposition
- K. Voelskow, L. Nickelsen, M. J. Becker, W. Xia, M. Muhler, U. Kunz, A. P. Weber, T. Turek, *Chem. Eng. J.* **234** (2013) 74-79. Optical investigation of carbon nanotube agglomerate growth on single catalyst particles
- V. I. Isaeva, O. P. Tkachenko, E. V. Afonina, L. M. Kozlova, G. I. Kapustin, W. Grünert, S. E. Solov'eva, I. S. Antipin, L. M. d L. M. Kustov, *Microporous Mesopor. Mater.* **166** (2013) 167-175. 2-Butyne-1,4-diol hydrogenation over palladium supported on Zn²⁺-based - MOF and host-guest MOF/calix[4]arene materials
- S. Shuvaev, I. S. Bushmarinov, I. Sinev, A. O. Dmitrienko, K. A. Lyssenko, V. Baulin, W. Grünert, A. Yu. Tsivadze, N. Kuzmina, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2013), 4823-4831. Copper(II) Complexes with Aromatic *o*-Phosphorylated Phenols – Synthesis, Crystal Structures, and X-ray Photoelectron Spectroscopy
- Abu Bakr Ahmed Amine Nassr, Ilya Sinev, Wolfgang Grünert, Michael Bron, *Appl. Catal. B.* **142** (2013) 849-860. PtNi supported on oxygen functionalized carbon nanotubes: in depth structural characterization and activity for methanol electrooxidation
- Guangjun Wu, Fei Hei, Nan Zhang, Naijia Guan, Landong Li, Wolfgang Grünert, *Appl. Catal. A* **468** (2013) 230-239. Oxidative dehydrogenation of propane with nitrous oxide over Fe-ZSM-5 prepared by grafting: Characterization and Performance
- P. Mäki-Arvela, N. Kumar, S. Faten Diáz, A. Aho, M. Tenho, J. Salonen, A.-R. Leino, K. Kordás, P. Laukkanen, J. Dahl, I. Sinev, T. Salmi, D. Yu. Murzin, Isomerization of β -pinene oxide over Sn-modified zeolites. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical* **366** (2013) 228-237.
- N. Kumar, P. Mäki-Arvela, S. Faten Diáz, A. Aho, Y. Demidova, J. Linden, A. Shepidchenko, M. Tenhu, J. Salonen, P. Laukkanen, A. Lashkul, J. Dahl, I. Sinev, A.-R. Leino, K. Kordas, T. Salmi, D. Yu. Murzin, Isomerization of α -pinene oxide over iron-modified zeolites. *Topics in Catalysis* **56** (2013) 696-713.
- D. Stodt, H. Noei, C. Hättig, Y. Wang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** (2013) 466-472. A combined experimental and computational study on the adsorption and reactions of NO on rutile TiO₂
- H. Noei, F. Gallino, L. Jin, J. Zhao, C. Di Valentin, Y. Wang, *Angew. Chem.* **125** (2013) 2031-2035; *Angew. Chem. Int. Ed.* **52** (2013) 1977-1981. Coverage-induced hydrogen transfer on ZnO surfaces: from ideal to real systems
- T. Alammar, H. Noei, Y. Wang, A.-V. Mudring, *Nanoscale*, **5** (2013) 8045-8050. Mild yet phase-selective preparation of TiO₂ nanoparticles from ionic liquids-a critical study
- B. Mei, A. Pougin, J. Strunk, *J. Catal.* **306** (2013) 184-189. Influence of photodeposited gold nanoparticles on the photocatalytic activity of titanate species in the reduction of CO₂ to hydrocarbons

Biochemie 1

- A. Orth, D. Tapken, M. Hollmann, *European Journal of Neuroscience* **37**(10) (2013) 1620-1630. The delta subfamily of glutamate receptors: Characterization of receptor chimeras and mutants
- D. Tapken, U. Anschütz, L.-H. Liu, T. Huelsken, G. Seeböhm, D. Becker, M. Hollmann, *Science Signaling* **6**(279, ra47) (2013) 1-11, A putative plant glutamate receptor emerges as an ion channel gated by multiple multiple hydrophobic amino acids. RUB-Pressemitteilung: <http://aktuell.ruhr-uni-bochum.de/pm2013/pm00191.html.de> F1000 Plant Biology
- S. Pachernegg, I. Joshi, E. Muth-Köhne, S. Pahl, Y. Münster, J. Terhag, M. Karus, M. Werner, Z.-L. Ma-Högemeyer, C. Körber, T. Grunwald, A. Faissner, S. Wiese, M. Hollmann, *Frontiers in Cellular Neuroscience*, **7**(article 241) (2013) 1-12, Undifferentiated embryonic stem cells express ionotropic glutamate receptor mRNAs
- S. Pahl, M. Hollmann, *IGSN Report 2013*, BoNeuroMed, Manahan-Vaughan, D. & Heiler, U. (eds.), 2013, pp. 34-37. The grave consequences of tinkering with single amino acids in glutamate receptors
- T. Huelsken, J. Keyse, L. Liggins, S. Penny, E.A. Trembl, C. Riginos, *PLoS One* **8**(11) (2013) e80858, Open Access. A novel widespread cryptic species and phylogeographic patterns within several giant clam species (Cardiidae: Tridacna) from the Indo-Pacific Ocean
- M. Hollmann, *Journal of Physiology*, Online Supplement, April 7, 2013: 1–3. Just two sides of the same coin? Comments on the CrossTalk proposal and opposing view: TARPs modulate AMPA receptor gating transitions/AMPA receptor conformations before the gating transitions
- K. Steinke, F. Sachse, N. Ettischer, N. Strutz-Seeböhm, U. Henrion, M. Rohrbeck, R. Klosowski, D. Wolters, S. Brunner, W.M. Franz, L. Pott, C. Munoz, R. Kandolf, E. Schulze-Bahr, F. Lang, K. Klingel, G. Seeböhm, *FASEB J.* **27**(10) (2013) 4108-4121. Cocksackievirus B3 modulates cardiac ion channels
- F.G. Boess, J. de Vry, C. Erb, T. Flessner, M. Hendrix, J. Luithle, C. Methfessel, K. Schnizler, F.J. van der Staay, M. van Kampen, W.B. Wiese, G. König, *Psychopharmacology* **227**(1) (2013) 1-17. Pharmacological and behavioral profile of N-[(3R)-1-azabicyclo[2.2.2]oct-3-yl]-6-chinolincarboxamide (EVP-5141), a novel 7 nicotinic acetylcholine receptor agonist/serotonin 5-HT(3) receptor antagonist

Biochemie 2

- M. Schöpel, K.F. Jockers, P.M. Döppe, J. Autzen, V.N. Potheraveedu, S. Ince, K.T. Yip, R. Heumann, C. Herrmann, J. Scherkenbeck, R. Stoll, *J Med Chem.* **56** (2013) 9664-72. Bisphenol A binds to Ras proteins and competes with guanine nucleotide exchange: implications for GTPase-selective antagonists
- A. Ehrkamp, C. Herrmann, R. Stoll, R. Heumann, *Cancers* **5** (2013) 639-61. Ras and rheb signaling in survival and cell death
- R. Heumann, *Biol Chem.* **394** (2013) 1551. Highlight: perspectives in molecular neurobiology
- D. Damen, R. Heumann, *Biol Chem.* **394** (2013) 1595-605. MeCP2 phosphorylation in the brain from transcription to behavior

- KF. Nickel, V. Laux, R. Heumann, G. von Degenfeld, *PLoS One* **8** (2013) e63504. Thrombin has biphasic effects on the nitric oxide-cGMP pathway in endothelial cells and contributes to experimental pulmonary hypertension
- J. Drost, D. Nonis, F. Eich, O. Leske, E. Damrath, ER. Brunt, I. Lastres-Becker, R. Heumann, J. Nowock, G. Auburger, *J Mol Neurosci.* **51** (2013) 68-81. Ataxin-2 modulates the levels of Grb2 and SRC but not ras signaling
- A. Kovtun, S. Neumann, M. Neumeier, H. Urch, R. Heumann, MM. Gepp, K. Wallat, M. Koeller, H. Zimmermann, M. Epple, *J Phys Chem B.* **14** (2013) 1550-5. Nanoparticle-mediated gene transfer from electrophoretically coated metal surfaces
- P. Happel, K. Möller, N.K. Schwering, I.D. Dietzel, *Scientific Reports* **3** (2013) article number: 1806, doi:10.1038/srep01806. Migrating oligodendrocyte progenitor cells swell prior to soma dislocation
- K. Kleinsimlinghaus, R. Marx, M. Serdar, I. Bendix, I.D.Dietzel, *Frontiers in Cellular Neuroscience* **7** (2013) article number 277, doi: 10.3389/fncel.2013.00277. Strategies for repair of white matter: Influence of osmolarity and microglia on proliferation and apoptosis of oligodendrocyte precursor cells in different basal culture media
- F. Wieberneit, A. Korste, H. B. Albada, N. Metzler-Nolte, R. Stoll, *Dalton Trans.* **42** (2013) 9799-9802. Structural and biological implications of the binding of Leu-enkephalin and its metal derivatives to opioid receptors [Cover story]
- F. Li, K. Bravo-Rodriguez, C. Phillips, R. W. Seidel, F. Wieberneit, R. Stoll. N. L. Doltsinis, E. Sanchez-Garcia, W. Sander, *J. Phys. Chem. B* **117** (2013) 3560-3570. Conformation and dynamics of a cyclic disulfide-bridged peptide: effects of temperature and solvent
- D. Díaz-Carballo, S. Gustmann, A. H. Acikelli, W. Bardenheuer, J. Klein, U. Dembinski, B. Kohl, K. T. Yip, A. Nazif, R. Stoll, D. Strumberg, *Int J Clin Pharmacol Ther.* **51** (2013) 54-55. Multi-targeted polycyclic polyprenylated acylphloroglucinols are major constituents of Cuban propolis and contributors to its anticancer activity
- A. H. Acikelli, S. Gustmann, W. Bardenheuer, J. Klein, U. Dembinski, B. Kohl, K. T. Yip, A. Nazif, R. Stoll, D. Strumberg, D. Díaz-Carballo, *Int J Clin Pharmacol Ther.* **51** (2013) 51-53. Flavonoids isolated from Caribbean propolis show cytotoxic activity in human cancer cell lines

Didaktik der Chemie

- K. Sommer, A. Russek, H. Kleinhorst, A. Kakoschke, N. Efinger, *CHEMKON* **5** (2013) 215-219. Kinder und Eltern machen gemeinsame Sache.
- K. Sommer, A. Russek, H. Kleinhorst, A. Kakoschke, N. Efinger, *CHEMKON* **5** (2013) 220-233. Konzeption von KEMIE.
- A. Kakoschke, H. Kleinhorst, A. Russek, N. Efinger, K. Sommer, *CHEMKON* **05** (2013) 234-339. KEMIE im Detail.
- A. Russek, K. Sommer, B. Leyendecker, *CHEMKON* **05** (2013) 340-342. Untersuchung zu Einstellungsänderungen bei Eltern durch die Teilnahme am Projekt KEMIE.
- H. Kleinhorst, K. Sommer, J. Wirth, *CHEMKON* **05** (2013) 343-347. Untersuchung zum Einfluss der Projektteilnahme auf die Anwendung von Variablenkontrolle bei Grundschulern.
- P. Pfeifer, K. Sommer, *NiU-Chemie* **137** (2013) 2-7. Körperpflegemittel im Unterricht.

- H. Kleinhorst, E. Füchtenschnieder, I. Cheema, K. Sommer, *NiU-Chemie* **137** (2013) 14-17. Die Haut - ein Organ mit Pflegeansprüchen.
- H. Steff, M. Buchwald, K. Sommer, *NiU-Chemie* **137** (2013) 18-23. Warum der Pharaon nicht lächelte
- Th. P. Schröder, A. Schäfer, P. Schmiedel, K. Kluthke, K. Sommer, *NiU-Chemie* **137** (2013) 24-30. Wie viel Kochsalz ist im Shampoo? Analytik einmal anders.
- H. Kleinhorst, Th. P. Schröder, A. Kakoschke, K. Sommer, *NiU-Chemie* **137** (2013) 31-35. Vom qualitativen Nachweis zur quantitativen Bestimmung - ein fachmethodisches Spiralcurriculum zur Analytik von Emulsionen.
- H. Kleinhorst, K. Sommer, *Beiträge zur Qualitativen Inhaltsanalyse* **22** (2013) 1-11. Wissen über naturwissenschaftliche Denkweisen schriftlich erfassen.
- K. Sommer, Ch. Strippel, S. Schaffer, R. Wieczorek, *Beiträge zur Qualitativen Inhaltsanalyse* **21** (2013) 1-9. Umgang mit fachmethodischen Begriffen in Versuchsvorschriften.
- J. Pietrzak, K. Sommer, *NiU-Chemie* **134** (2013) 49-50. Maßanalytische Bestimmung des Vanillingehalts in Vanillezucker.
- K. Sommer, *Chemie & Schule* **04** (2013) 5-8. Vanillezucker vs. Vanillinzucker.
- K. Sommer, H. Kleinhorst, A. Russek, A. Kakoschke, *MNU Dokumentation* (2013) 7-13. Zur Konzeption eines fachmethodischen Spiralcurriculums.

Promotionen 2013

Josef Christian Meier

Degradation phenomena and design principles for stable and active Pt/C fuel cell catalysts
Dr. K.J.J. Mayrhofer
20.12.2013

Felix Herrmann Richter

Mesoporous Polymers as Catalysts for the Conversion of Biomass
Prof. Dr. F. Schüth
20.12.2013

Luis Martínez-Suárez

Theoretical Study of the Methanol Synthesis on Cu/ZnO Catalysts
Prof. Dr. D. Marx
13.12.2013

Anna M. Sosniak

Effects of RNA Distortion and Base Stacking in PNA-based Artificial RNases
Prof. Dr. N. Metzler-Nolte
03.12.2013

Jan Christoph Dittrich

Peptid-Funktionalisierte Gold(III)-Komplexe als Substrat für Matrix-Metalloprotease 2
Prof. Dr. N. Metzler-Nolte
29.11.2013

Frederic Sebastian Brosse

Differentielle Proteomstudien peripherer humaner Fibroblasten, Monozyten und T-Lymphozyten sowie murinen Hirngewebes im Kontext der Parkinson-Erkrankung
Prof. Dr. Katrin Marcus
28.11.2013

Lutz Stratmann

Strukturierungen organischer Oberflächen mittels des elektrochemischen Rastermikroskops. Entwicklung eines Epstein-Barr-Virus-Immunassays
Prof. Dr. W. Schuhmann
06.11.2013

Julia Klemm, geb. Lengsfeld

Element resolved corrosion analysis of stainless steel-type glass forming steels and the correlation to their microstructure
Prof. Dr. M. Stratmann
06.11.2013

Fouzi El Magraoui

Identifizierung und Charakterisierung der peroxisomalen Ubiquitinierungs-Maschinerie von *Saccharomyces cerevisiae*
Prof. Dr. R. Erdmann
25.10.2013

Manish Banerjee

Design, Synthesis and Evaluation of Guanidines, Ketoamines and Aminoalkoxides Based Precursors for Thin Film Deposition of ZrO₂ and TiO₂
Prof. Dr. Anjana Devi
18.10.2013

Ke Xu

Contribution towards ALD and MOCVD of Rare Earth Oxides and Hafnium Oxide: From Precursor Evaluation to Process Development and Thin Film Characterization

Prof. Dr. Anjana Devi

18.10.2013

Mei Yang

Mesophase Formation of Imidazolium Based Ionic Liquids

Prof. Dr. A.-V. Mudring

15.10.2013

Vijayalakshmi Annamalai

The structural and biochemical studies on members of the dynamin superfamily

Prof. Dr. Ch. Herrmann

11.10.2013

Xingyu Wang

Valorization of lignin and bio-oil by catalytic hydrogenation with Ni catalyst

Dr. R. Rinaldi

30.09.2013

Nadine Ackermann

Biochemische und funktionelle Untersuchung der Multidomänenproteine PTPN13 und OCRL1

Priv.-Doz. Dr. Kai S. Erdmann

27.09.2013

Yanping Jiang

Dielektrische Relaxationsspektroskopie ionischer Flüssigkeiten in organischen Lösungsmitteln

Prof. Dr. H. Weingärtner

27.09.2013

Verena Theis geb. Schwarz

Etablierung der Lasermikrodissektion zur proteomischen Analyse von humanem Filaminopathiegewebe und murinen Myoblasten

Prof. Dr. Katrin Marcus

26.09.2013

Konrad Kaspar Meister

Terahertz-Spektroskopie von natürlichen Kryoprotektoren - Hydrationsdynamiken von Gefrierschutzproteinen

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

24.09.2013

Meike Mischo

Medical Applications of Vibrational Spectroscopy

Disease Characterization, Therapy Surveillance and Development of High-Resolution Technology

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

24.09.2013

Marina Wotske

Massenspektrometrische Analyse des Prenyloms

Dr. Dirk Wolters

18.09.2013

Vinay Sharma

THz Spectroscopy of Solvated Ions - Exploring Hydration Dynamics of Aqueous Lanthanides and Transition Metal Halides

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

10.09.2013

Fabrizio Zanta

Folding and Self-Association Studies of the Dimerization Domain of the Id3 Protein
Prof. Dr. Ch. Cabrele
22.08.2013

Christian Dietz

Resorcin[4]aren-Komplexe
Prof. Dr. G. Dyker
22.08.2013

Christine Dovengerds

Membraninteraktionen von großen Dynamin-verwandten GTPasen
Prof. Dr. Ch. Herrmann
16.08.2013

Kamila Anna Adamczyk

Untersuchungen zur Freisetzung verschiedener Isoformen von EGFR und CDCP1 in Sekretomen und Exosomen von Pankreaskarzinom-Zelllinien
Priv.-Doz. Dr. I. Schwarte-Waldhoff
12.08.2013

Qiang Niu

Synthesis and characterization of carbon-based catalysts for the growth of tailor-made multi-walled carbon nanotubes
Prof. Dr. M. Muhler
09.08.2013

Carola Sophie Hengstenberg

Structural Dynamics and Implications for Dimer Formation of Human Guanylate-Binding Protein 1
Prof. Dr. Ch. Herrmann
26.07.2013

Marie Christine Holz

Spectroscopic and kinetic investigations of the oxidation of short-chain alcohols over supported Au catalysts to probe metal-support interactions
Prof. Dr. M. Muhler
25.07.2013

Nathalie Wojtalewicz

Untersuchungen zur Funktion des darmspezifischen Cadherin-17s und zur Prozessierung des Fat1-Cadherins sowie dessen Verwendbarkeit als potenzieller Tumormarker für das Pankreaskarzinom
Priv.-Doz. Dr. I. Schwarte-Waldhoff
24.07.2013

Mhd. Bassel Malas

Nachweis und Analyse von extrazellulären Nukleinsäuren (kleine RNAs) aus Pankreas-Tumorzellen in vitro: Exosomale miRNA als Abbild der Tumorzelle und als Quelle für neuartige Biomarker
Priv.-Doz. Dr. I. Schwarte-Waldhoff
24.07.2013

Niels Alexander Heutz

Palladium- und Palladiumoxid-Katalysatoren in der Alkoholorxidation - Untersuchungen katalytischer Eigenschaften und alternativer Syntheserouten
Dr. K. Merz
19.07.2013

Peirong Chen

Synthesis, modification and catalytic applications of multi-walled carbon nanotubes
Prof. Dr. M. Muhler
19.07.2013

Melanie Letzner

Hochauflösende IR-Spektroskopie molekularer Aggregate - HCl-Wasser, Pyridin-Wasser und Glycin - im Heliumtröpfchen
Prof. Dr. M. Havenith-Newen
16.07.2013

Diana Carolina Galeano Nuñez

Nanostructured Carbon Materials for Applications in Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells
Prof. Dr. F. Schüth
12.07.2013

Bastian Grewe

Influence of HIV-1 Rev and Gag on the post-transcriptional fate of the viral genomic RNA
Prof. Dr. med. K. Überla
12.07.2013

Stefan Klink

In-Depth Analysis of Irreversible Processes in Lithium Ion Batteries
Prof. Dr. W. Schuhmann
05.07.2013

Sascha Helmut Karl Pöller

Optimierung von Redoxpolymeren für Biosensoren und Biobrennstoffzellen und ihre Stabilisierung auf Elektrodenoberflächen
Prof. Dr. W. Schuhmann
05.07.2013

Fee Li

Synthese und Charakterisierung cyclisch disulfidverbrückter Modellpeptide - Konformations- und Dynamikstudien
Prof. Dr. W. Sander
31.05.2013

Lanying Jin

Structure and reactivity of different ZnO and Cu/ZnO surfaces studied by HREELS
Dr. Y. Wang
24.05.2013

Dennis Großmann

Methanol Synthesis over Cu/ZnO aggregates encapsulated in carbon nanotubes and mesoporous silica
Prof. Dr. W. Grünert
24.05.2013

Christoph Krisp

Proteomic profiling of exudates from diabetic foot ulcers and acute wounds using mass spectrometry
Dr. Dirk Wolters
17.05.2013

Dorothee Stodt

Untersuchung des Adsorptionsverhaltens von Stickoxiden und H₂O₂ auf der Rutil-(110)-TiO₂-Oberfläche
Prof. Dr. C. Hättig
26.04.2013

Andreas Schrötter

Funktionelle Analyse des APP/FE65/TIP60-Komplexes unter Verwendung eines shRNA-vermittelten Knockdowns in humaner Zellkultur: Neue Implikationen für Morbus Alzheimer
Prof. Dr. Katrin Marcus
26.04.2013

Bastian Timo Mei

Heterogeneous Photoelectrochemistry and Photocatalysis of TiO₂-based Nanomaterials -Towards photocatalytic CO₂ reduction-
Prof. Dr. M. Muhler
19.04.2013

Helma Katharina Kleinhorst

KEMIEplus - Konzeption und Wirksamkeit von Experimentiereinheiten mit dem Schwerpunkt "naturwissenschaftliche Denk- und Arbeitsweisen"
Prof. Dr. K. Sommer
19.04.2013

Caroline Bischof

Building Blocks for Multinuclear Near-IR Luminescent Lanthanide Complexes
Dr. M. Seitz
12.04.2013

Saonli Roy

Interaction of Aromatic Radicals with Small Molecules: Matrix Isolation and Computational Studies
Prof. Dr. W. Sander
28.03.2013

Eva Margarethe Wrobel

Untersuchung des Mechanismus und der molekularen Bindestelle des Kv7.1/KCNE1-Inhibitors JNJ303
Prof. Dr. Guiscard Seebohm
26.03.2013

Maria Teresa da Costa e Castro Mónica de Oliveira

Diastereodivergent Processes in Allylic Alkylation: Stereoselective Synthesis of Cyclobutenes
Dr. Nuno Maulide
22.03.2013

Viviana Valerio

Cascade Electrophilic Activation of Amides: Stereoselective Synthesis of Substituted Lactones
Dr. Nuno Maulide
22.03.2013

Simantini Nayak

Investigation of Electrochemical Oxygen Reduction on Semiconductor Surfaces by Attenuated Total Internal Reflection Infrared Spectroscopy
Prof. Dr. M. Stratmann
18.03.2013

Torsten Endres

Untersuchung der Aggregation kleiner Aromaten in Heliumtröpfchen mittels Stark-Feld-IR-Spektroskopie
Prof. Dr. M. Havenith-Newen
15.03.2013

Joanna Maria Bäcker

Übergangsmetalle in Ionischen Flüssigkeiten
Prof. Dr. A.-V. Mudring
08.03.2013

Frederik Großerüschkamp

FTIR-spektroskopische Untersuchungen an der kleinen GTPase Ras und kolorektalem Karzinom
Prof. Dr. Klaus Gerwert
22.02.2013

Konstantin Gavriljuk

FTIR-spektroskopische Untersuchungen von Rab GTPasen

Prof. Dr. Klaus Gerwert

22.02.2013

Heiko Becker

Wie verändert der SMAD4-Verlust die Interaktionen zwischen Tumorzellen sowie Matrix und Stroma an der invasiven Front? Einblicke in mögliche Mechanismen durch umfassende Untersuchungen des Transkripts

Priv.-Doz. Dr. I. Schwarte-Waldhoff

15.02.2013

Andrea Puschhof

T-SECM. Lokal aufgelöste elektrokatalytische Aktivität der Sauerstoffreduktion in Abhängigkeit der Temperatur

Prof. Dr. W. Schuhmann

25.01.2013

Nicola Alzakhem

Stable Lanthanide Cryptates as Building Blocks for Solid Phase Peptide Synthesis - Synthesis, Functionalization and Photophysical Properties

Dr. M. Seitz

25.01.2013

Minling Shao

Design of efficient electron transfer pathways for enzymatic biofuel cell anodes

Prof. Dr. W. Schuhmann

18.01.2013

Romina Krieg

Untersuchungen zur Inhibition der Sauerstoffreduktion durch Zink-basierende Korrosionsproduktschichten

Prof. Dr. M. Stratmann

11.01.2013

Nongnuch Artrith

High-Dimensional Neural Network Potentials for Solids and Surfaces: Applications to Copper and Zinc Oxide

Dr. J. Behler

11.01.2013