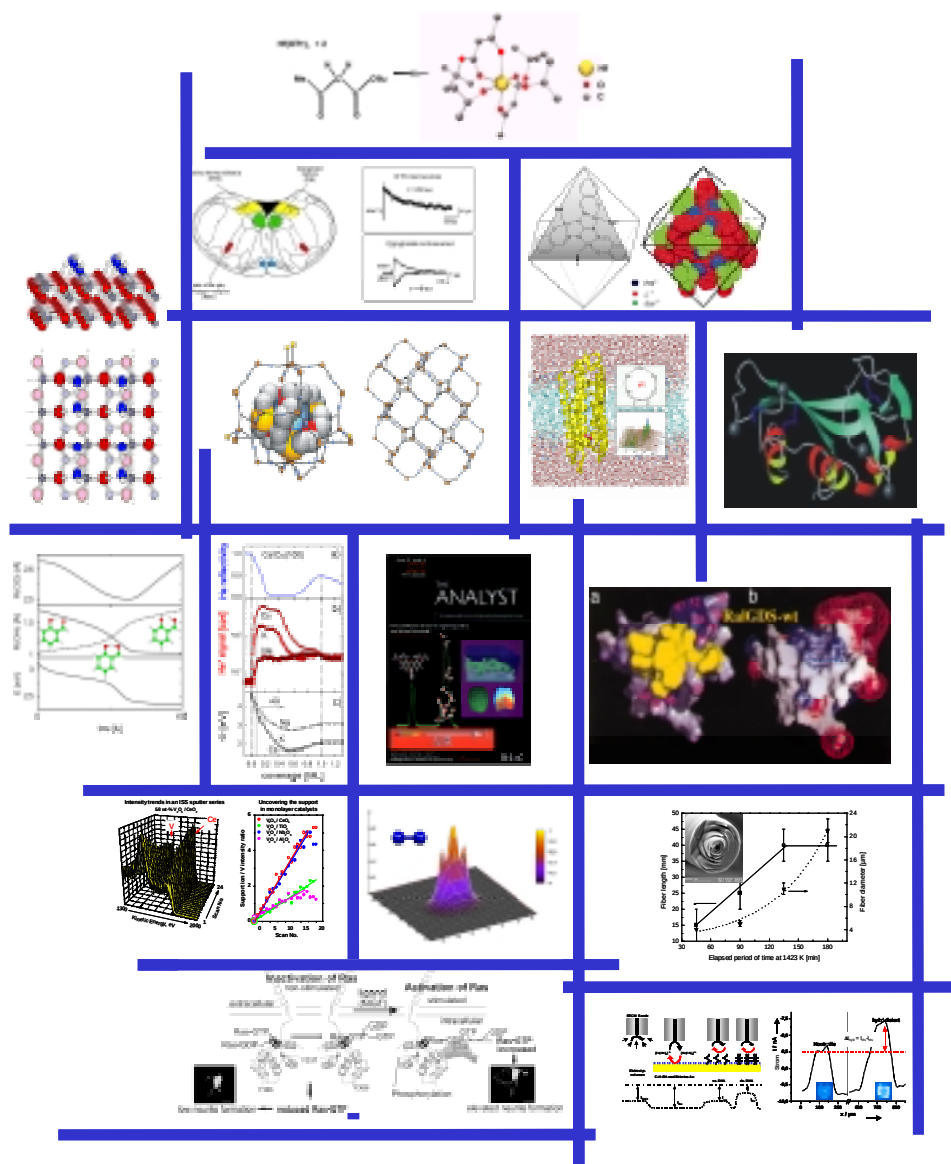


Ruhr-Universität Bochum

Fakultät für Chemie

Forschung 2004



Research 2004

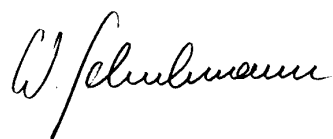
Faculty of Chemistry

Ruhr-Universität Bochum

Dieser Jahresbericht soll einen kurzen Eindruck über die Vielfältigkeit der Forschung in der Fakultät für Chemie der Ruhr-Universität Bochum im Jahre 2004 vermitteln. Die Fakultät hat sich in der Forschungslandschaft in Deutschland aber auch aus internationaler Sicht sehr gut positioniert, so dass wir auch in schwierigen Zeiten mit Tatkraft und Optimismus die vielfältigen Aufgaben in Forschung und Lehre weiter angehen werden.

Wenn Sie zu den einzelnen Themen weitere Informationen wünschen, können Sie unter den angegebenen Adressen der Homepages der Arbeitsgruppen oder über die Homepage der Fakultät (www.ruhr-uni-bochum.de/chemie) vertiefte Einblicke erhalten.

Bochum, den 01.04.2005

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'W. Schuhmann', written in a cursive style.

(Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann; Fakultätsbeauftragter für Öffentlichkeitsarbeit)

Beispiele aus der Forschung

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2

Prof. Dr. Roland Fischer (Organometallics & Materials).....	4
Dr. Rochus Schmid.....	5
JP Dr. Anjana Devi (Chemie anorganischer Materialien)	6

Lehrstuhl für Organische Chemie 1

Prof. Dr. Sabine Müller (Bioorganische Chemie)	7
--	---

Lehrstuhl für Organische Chemie 2

Prof. Dr. Wolfram Sander	8
PD Dr. Götz Bucher.....	9
Dr. Holger Bettinger	10
Prof. Dr. Gerald Dyker (Metallorganische Synthesechemie)	11

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1

Prof. Dr. Christof Wöll	12
Dr. Gregor Witte.....	13
Prof. Dr. Christian Herrmann (Protein-Interaktionen)	14
Prof. Dr. Friedrich Stuhl (Laser und Luftchemie).....	15

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 2

Prof. Dr. Martina Havenith-Newen	17
Prof. Dr. Herrmann Weingärtner (Physikalische Chemie der Flüssigkeiten).....	18
Prof. (em.) Dr. Gerhard Schneider	19

Lehrstuhl für Analytische Chemie

Prof. Dr. William Sheldrick	20
Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann (Elektroanalytik & Sensorik)	21
Dr. Peter Zinn	22
Dr. I. Müller	23
JP Dr. Raphael Stoll.....	24

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Dominik Marx.....	25
Dr. Nikos L. Doltsinis	26
Dr. Bernd Meyer.....	27
Prof. Dr. Volker Staemmler (Quantenchemie).....	28
Prof. (em.) Dr. Werner Kutzelnigg.....	29

Lehrstuhl für Technische Chemie

Prof. Dr. Martin Muhler.....	30
PD Dr. Kai-Olaf Hinrichsen.....	31
Prof. Dr. Wolfgang Grünert (Struktur/Reaktivität heterogener Katalysatoren).....	32

Lehrstuhl für Biochemie 1

Prof. Dr. Michael Hollmann (Rezeptorbiochemie)	33
Prof. Dr. Bernd-Joachim Benecke.....	34

Lehrstuhl für Biochemie 2

Prof. Dr. Rolf Heumann (Molekulare Neurobiochemie)	35
PD Dr. Andrea Blöchl.....	36
PD Dr. Irmgard Dietzel-Meyer (Elektrochemie neuraler Zellen)	37

Didaktik der Chemie

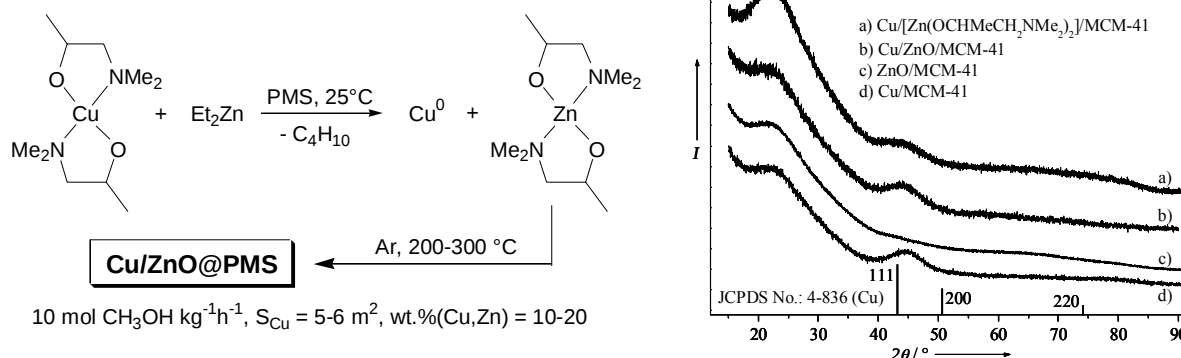
Prof. Dr. Katrin Sommer	38
-------------------------------	----

Roland A. Fischer

Anorganische Chemie II – Organometallics & Materials;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3224174; FAX: ++49-(0)234-3214174
email: Roland.Fischer@ruhr-uni-bochum.de
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/aci2/>

R. Becker, H. Parala, F. Hipler, O. P. Tkachenko, K. Klementiev, W. Grunert, H. Wilmer, O. Hinrichsen, M. Muhler, A. Birkner, C. Woell, S. Schafer, R. A. Fischer, *Angew. Chem.* **116** (2004) 2899-2903, MOCVD Beladung mesoporöser Silikatmatrizen mit Cu/ZnO: neuartige Trägerkatalysatoren für die Methanolsynthese; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **43** (2004) 2839-2842. MOCVD-loading of mesoporous siliceous matrices with Cu/ZnO: Supported catalysts for methanol synthesis.

Periodische mesoporöse Silicatmaterialien (PMS) vom Typ MCM-41 und MCM-48 sind bekannt für Ihre Eignung als Trägermaterialien für heterogene Katalysatoren. Die sehr hohe spezifische Oberfläche von ca. 1000 m²/g und die Porenstruktur bieten interessante Möglichkeiten nanoskalige, katalytisch aktive Metallpartikel effizient an der inneren Oberfläche zu verankern und auch gegen Partikelwachstum zu stabilisieren. Unter Verwendung spezieller molekularer Precursor und MOCVD-Techniken gelang uns nun die Präparation eines nanokompositären Cu/ZnO-Katalysators für die Methanolsynthese: (1) Gasphasenbeladung der PMS mit [Cu(OCH(CH₃)CH₂NMe₂)₂], (2) Behandlung mit ZnEt₂-Dampf und (3) Tempern lieferte den Nanokomposit Cu/ZnO@PMS dessen katalytische Aktivität Vergleichsproben entsprach, die durch Kopräzipitation/Kalzinierung präpariert wurden. Die Promotor-Komponente ZnO ist in unserem Fall allerdings nicht aggregiert und die Cu-Partikel sind gemäß EXAFS-Messungen und Röntgenbeugung sehr klein (ca. 1-2 nm). Die Arbeit entstand in Kooperation innerhalb des Sonderforschungsbereichs 558 „Metall-Substrat-wechselwirkung in der Heterogenen Katalyse“.



Periodic mesoporous siliceous materials (PMS) of the type MCM-41 and MCM-48 are known to be well suited as support materials for heterogeneous catalysts. The very large specific surface area of ca. 1000 m²/g and the pore structure offers interesting possibilities to effectively anchor nanoscale and catalytically active metal particles to the internal surface and stabilise them against particle growth. By using special molecular precursors and MOCVD techniques we succeeded in the preparation of a nanocomposite Cu/ZnO catalyst for methanol synthesis: (1) gas-phase impregnation of PMS with [Cu(OCH(CH₃)CH₂NMe₂)₂], (2) treatment with ZnEt₂ vapour and (3) tempering gave Cu/ZnO@PMS, which catalytic activity matches well with relevant samples obtained by co-precipitation/calcinations procedures. The promotor component ZnO is not aggregated and the Cu particles are very small (1-2 nm) according EXAFS and PXRD studies. This work was accomplished by collaboration within the Research Center 558 on “Metal Support Interaction in Heterogeneous Catalysis”.

Rochus Schmid

Anorganische Chemie II, Organometallics and Materials

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

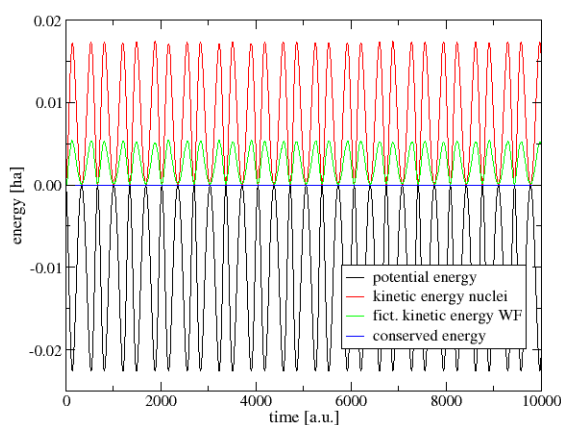
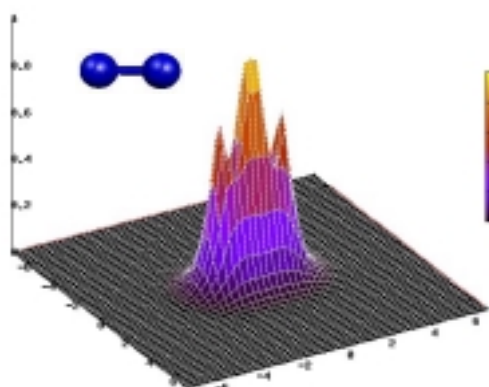
Tel. ++49 234 32 24166 Fax. ++49 234 32 14174

rochus.schmid@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.rub.de/acii2/schmid/>

R. Schmid, *J. Comput. Chem.* **2004**, 25, 799-812. Car-Parrinello Molecular-Dynamics Simulations with Real Space Methods

Gitterbasierte Methoden stellen einen effizienten und in vielen Feldern verbreiteten Ansatz zur Lösung Partieller Differentialgleichungen dar, da sie sich vor allem durch ihre gute Parallelisierbarkeit auszeichnen. Im Bereich der Theoretischen Chemie wird jedoch erst seit kurzem versucht, Wellenfunktion und Elektronendichte in sogenannten Realraummethoden ausschließlich auf numerischen Gittern darzustellen.

Die Arbeit beschreibt die erste Implementation einer Realraummethode unter der Verwendung der Car-Parrinello Technik, die sich für Moleküldynamik-Simulationen mit ebenen Wellen etabliert hat. Entscheidend ist dabei die Genauigkeit des Coulombpotentials der Elektronendichte, welches in jedem Zeitschritt durch iterative Lösung der Poisson-Gleichung erhalten wird. Die Abbildung links zeigt die Valenzelektronendichte des Testsystems N_2 . Am Beispiel des schwingenden N_2 Moleküls ist rechts gezeigt, dass eine energiekonservierende MD-Simulation realisiert werden kann. Im selbst entwickelten Programm *RSDFT* wird dabei ein moderner objektorientierter Ansatz verwendet (<http://www.rsdf.org>).



Grid based methods are an efficient and widely used approach for the solution of partial differential equations, which can be well parallelized. In theoretical chemistry, however, only recently so called real space methods have been developed, where wave functions and electron density are solely represented on numeric grids.

This work describes the first implementation of a real space method using the Car-Parrinello technique, which has been established for molecular dynamics simulations in connection with a plane wave representation. The accuracy of the Coulomb potential of the electron density, which is calculated via an iterative solution of the Poisson equation at each timestep, was found to be crucial. The figure on the left shows the valence electron density of the test system N_2 . On the example of an oscillating N_2 it is shown on the right that energy conserving dynamics can be achieved. For the self developed code *RSDFT* a modern object oriented approach is used (<http://www.rsdf.org>).

Anjana Devi

AG Chemie Anorganischer Materialien
c/o Lehrstuhl für Anorganische Chemie II,
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

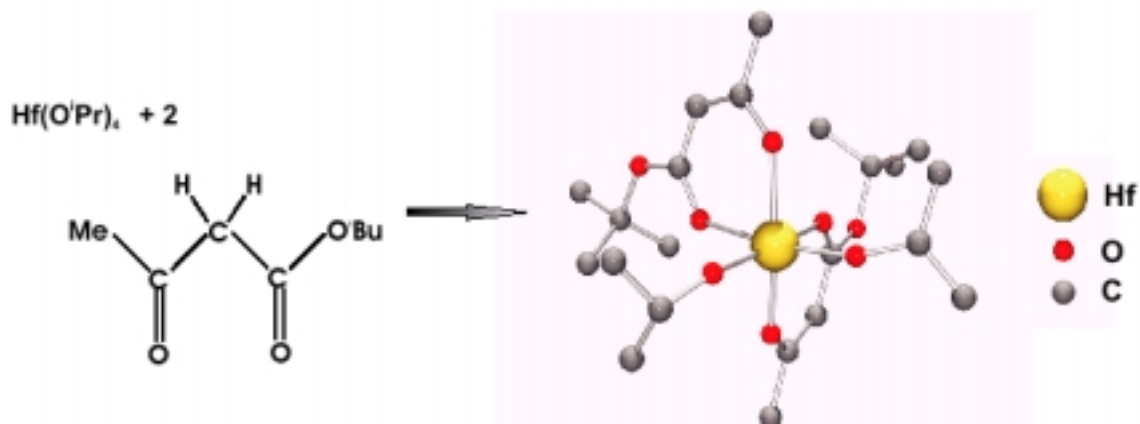
Tel.: ++49-(0)234-3224150; FAX: ++49-(0)234-3214174

email: anjana.devi@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/acii2>

A. Baunemann, R. Thomas, R. Becker, M. Winter, R. A. Fischer, P. Ehrhart, R. Waser, and A. Devi*, Mononuclear precursor for MOCVD of HfO₂ thin films, Chemical Communications **14** (2004) 1610-1611. **Hot Paper - June 2004.**

Promising new precursor for semiconductor devices:

Hafnium Dioxide Dünnschichten werden wegen ihrer vorteilhaften elektrischen Eigenschaften als zukünftiger Ersatz des bei der Herstellung von „gate dielectrics“ verwendeten SiO₂ betrachtet. Ein wichtiger Schritt bei der Herstellung der für elektronische Bauteile geeigneten Dünnschichten ist die Verdampfung von flüchtigen Precursoren, die danach thermisch oder chemisch zersetzt werden, um die entsprechenden Dünnschichten zu erzeugen. Die zurzeit bekannten Precursoren auf Hafnium-Basis erfüllen allerdings keine der erforderlichen Charakteristika einschließlich „shelf-life“ und Widerstandsfähigkeit gegen Oligomerisierung. In dieser Kommunikation (Kurzbericht) haben wir eine neue stabile und einfache synthetisierbare metallorganische Verbindung berichtet, die die erforderlichen Eigenschaften erfüllt. Die neue Verbindung ist in einem industriellen MOCVD Reaktor (metallorganischen chemischen Dampfabscheidungsreaktor) getestet worden und zeigt ausgezeichnetes Potential zur Herstellung von hochwertigen Dünnschichten.



Hafnium dioxide thin films are seen as a future replacement for silicon dioxide as a material for gate dielectrics, because of its favourable electrical properties. A key step in producing thin films for electronic devices is the vaporisation of volatile precursors which are then decomposed thermally or chemically to yield films. Until now, however, existing hafnium-based precursors lack all of the necessary qualities including shelf-life and resistance to oligomerisation. In this communication we reported a new stable and easily-synthesised metalorganic compound with the requisite properties. The new compound has been tested in an industrial tool metalorganic chemical vapour deposition reactor (MOCVD) and shows excellent potential for growing device quality thin films.

Sabine Müller

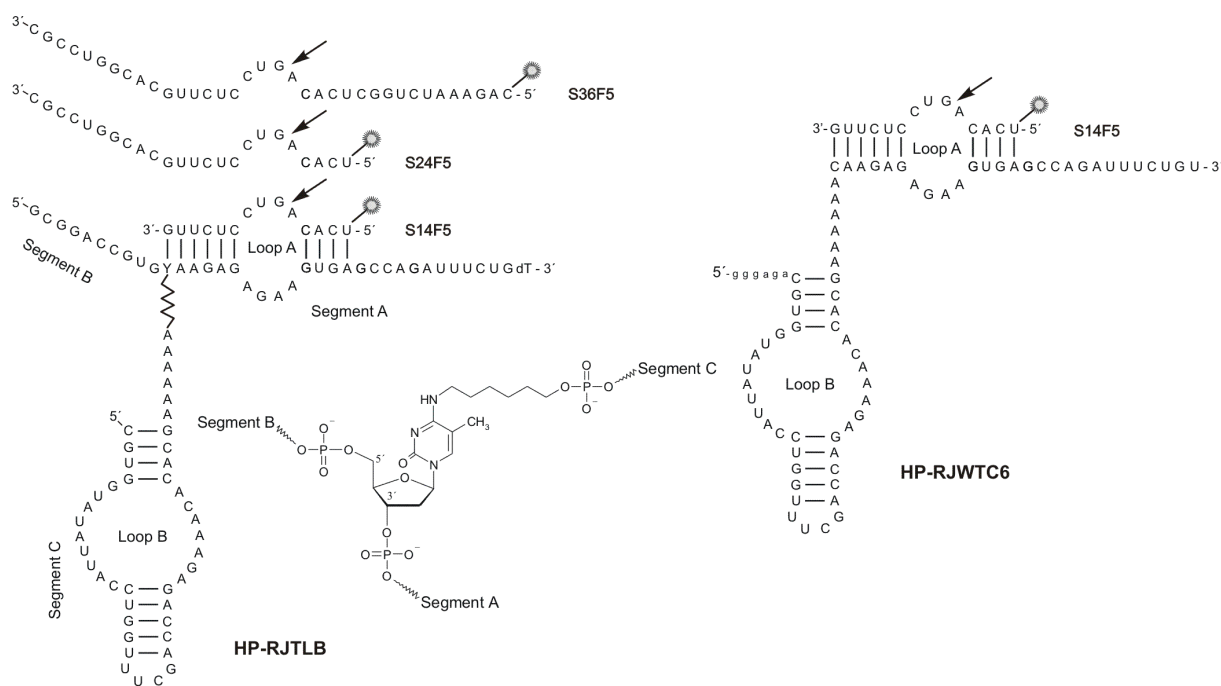
Org. Chem. – Bioorganik, Ribozyme; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3227034; FAX: ++49-(0)234-3214783

email: sabine.w.mueller@rub.de; [http:// www.ruhr-uni-bochum.de/bioorganik/](http://www.ruhr-uni-bochum.de/bioorganik/)

S. A. Ivanov, E. M. Volkov, T. S. Oretskaya, S. Müller, *Tetrahedron* **60** (2004) 9273-9281.
Chemical synthesis of an artificially branched hairpin ribozyme variant with RNA cleavage activity.

Die fundamentalen Entwicklungen auf dem Gebiet der RNA-Synthese über die vergangenen 10 Jahre erlauben heute die routinierte Präparation von Oligoribonucleotiden mit Längen größer als 50 Nucleotide. Wir haben ein insgesamt 81 Nucleotide langes verzweigtes RNA Molekül synthetisiert, das katalytische Eigenschaften aufweist und geeignete RNA-Substrate spezifisch zu spalten vermag. Es leitet sich vom Hairpinribozym, einer kleinen natürlich vorkommenden katalytischen RNA, ab. Das Hairpinribozym besteht aus zwei separat gefalteten Domänen (loop A und loop B Domäne), die sich in verschiedener Art und Weise miteinander kombinieren lassen ohne Verlust an katalytischer Aktivität. In unserem chemisch synthetisierten Konstrukt haben wir die beiden Domänen durch Einbau von 2'-desoxy-N4-(6-hydroxyhexyl)-5-methylcytidine über eine künstliche Verzweigung miteinander verbunden.



Due to the development in the field of RNA synthesis over the past decade of years, preparation of RNA oligonucleotides longer than 50 nucleotides is possible today. In this report we describe the chemical preparation of a branched RNA molecule with RNA cleavage activity consisting of 81 nucleotides. It is derived from the hairpin ribozyme, a small catalytic RNA occurring in nature. The hairpin ribozyme consists of two separately folded domains (loop A and loop B domain), which can be joined in a number of different ways without loss of activity. In the construct presented here, 2'-desoxy-N4-(6-hydroxyhexyl)-5-methylcytidine was introduced to connect the loop B domain with the loop A domain *via* an artificial branch. The synthesized branched RNA is able to catalyze the cleavage of a number of suitable substrates.

Wolfram Sander

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

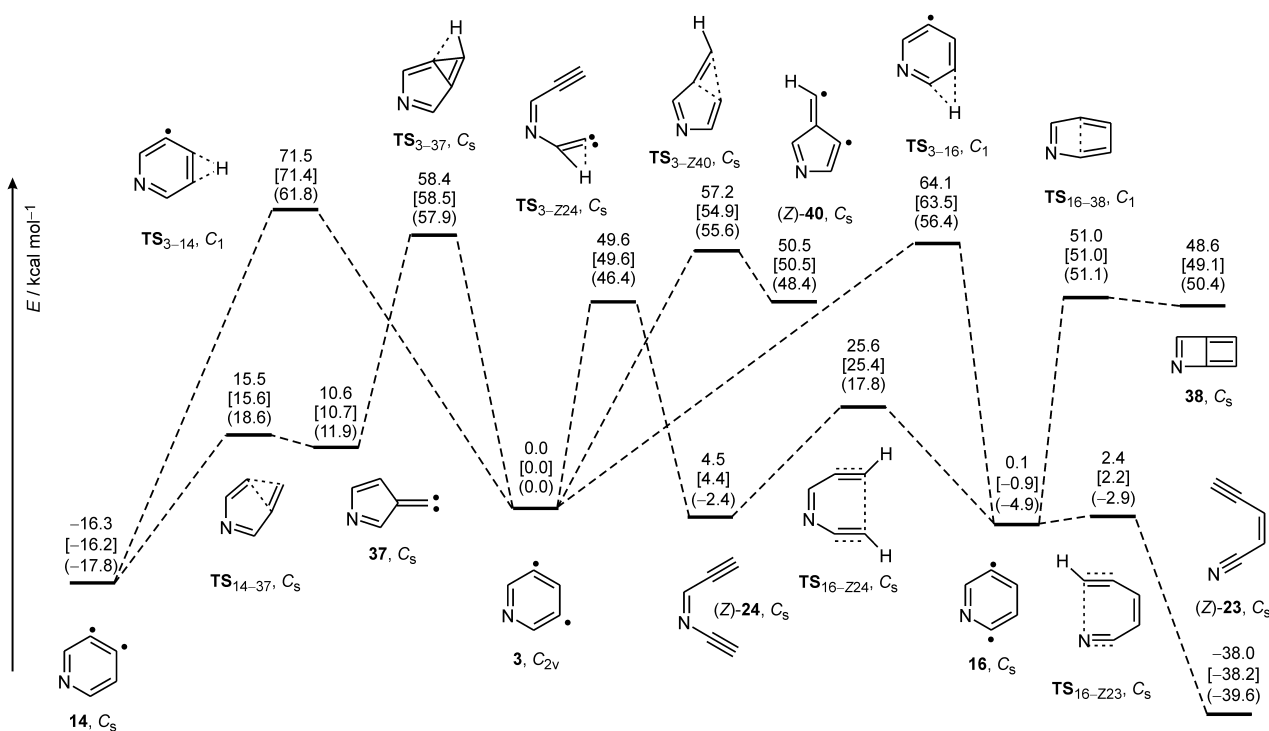
Tel.: ++49-(0)234-3224593; FAX: ++49-(0)234-3214353

Email: wolfram.sander@ruhr-uni-bochum.de

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

Michael Winkler, Bayram Cakir, Wolfram Sander, *J. Am. Chem. Soc.* **126** (2004), 6135 – 6149. 3,5-Pyridyne – A Heterocyclic meta-Benzyne Derivative

Didehydroaromaten (Arine) sind als reaktive Intermediate in der Synthese von Bedeutung und spielen bei vielen chemischen Reaktionen eine Rolle. Das neu erwachte Interesse an heterocyclischen Arinen hängt mit Überlegungen zur Steigerung der Selektivität von Endiin-Cytostatika zusammen. Heterocyclische Derivate des *meta*-Didehydrobenzols sind in diesem Zusammenhang bislang kaum untersucht worden. In dieser Arbeit berichten wir über die Matrixisolation von 3,5-Didehydropyridin **3**, dem ersten Derivat eines Didehydropyridins, das spektroskopisch charakterisiert werden konnte.



Arynes are useful reactive intermediates in synthesis, and they also play a crucial role in a number of chemical reactions. Interest in heterocyclic arynes increased recently due to their potential application as more selective warheads in endiine antitumor agents. In this context heterocyclic *meta*-benzyne derivatives have not yet received the attention they deserve. Using matrix isolation spectroscopy it was possible to isolate 3,5-pyridyne **3**, the first pyridyne that could be characterized spectroscopically.

Götz Bucher

Lehrstuhl für Organische Chemie II, Ruhr-Universität Bochum

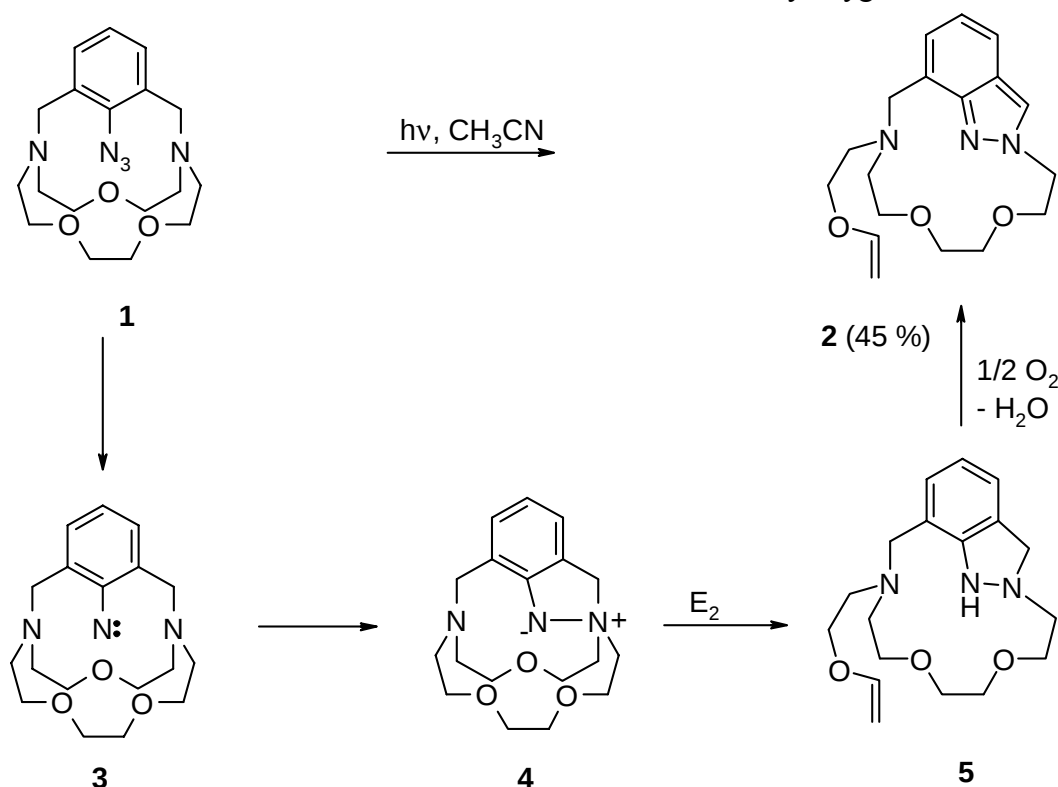
Universitätsstr. 150, D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224421; FAX: ++49-(0)234-3214353

email: goetz.bucher@rub.de; [http:// www.orch.ruhr-uni-bochum.de/bucher/bucher.html](http://www.orch.ruhr-uni-bochum.de/bucher/bucher.html)

C. Tönshoff, G. Bucher, *Eur. J. Org. Chem.* **2004**, 269-271. Evidence for intramolecular ylide formation in the decay of a singlet aryl nitrene

What happens, if an aryl nitrene is placed in the interior of a cryptand? There are many interesting aspects to this question. Interaction nitrene / alkali cation, yes or no? Interaction between nitrene and *tert.*-amine lone pairs? Novel nitrene chemistry? We have studied this research topic with a number of examples. The first part of this study is dedicated to smaller cryptand systems. Unlike larger ring cryptands, which do not show this type of reactivity, photolysis of **1** results in the formation of indazole **2** in moderate yield. The formation of **2** can be rationalized to occur via nitrene-amine-ylide **4**, which yields indazoline **5** in an intramolecular E₂ elimination reaction. The latter is oxidized to **2** by oxygen.



Was passiert, wenn man ein Arylnitren im Inneren eines Kryptandsystems postiert? Diese Fragestellung weist zahlreiche interessante Aspekte auf: Wechselwirkung Nitren / Alkalikationen, ja oder nein? Wechselwirkung Nitren / *tert.* Amin-Elektronenpaare? Neuartige Nitrenreaktionen? Wir haben diese Forschungsthematik an einer Serie von konkreten Beispielen studiert. Der erste Teil dieser Studie widmet sich relativ kleinen Kryptandsystemen. Im Unterschied zu analogen größeren Kryptandsystemen führt die Photolyse von **1** zum Indazolderivat **2** in moderater Ausbeute. Die Bildung von **2** läßt sich nur über die intermediäre Bildung eines Nitren-Amin-Ylides **4** rationalisieren, welches über eine intramolekulare E₂-Eliminierung zum Indazolin **5** abreagiert. Letzteres wird dann durch Luftsauerstoff in das Indazol **2** überführt.

Holger F. Bettinger

Lehrstuhl für Organische Chemie 2; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

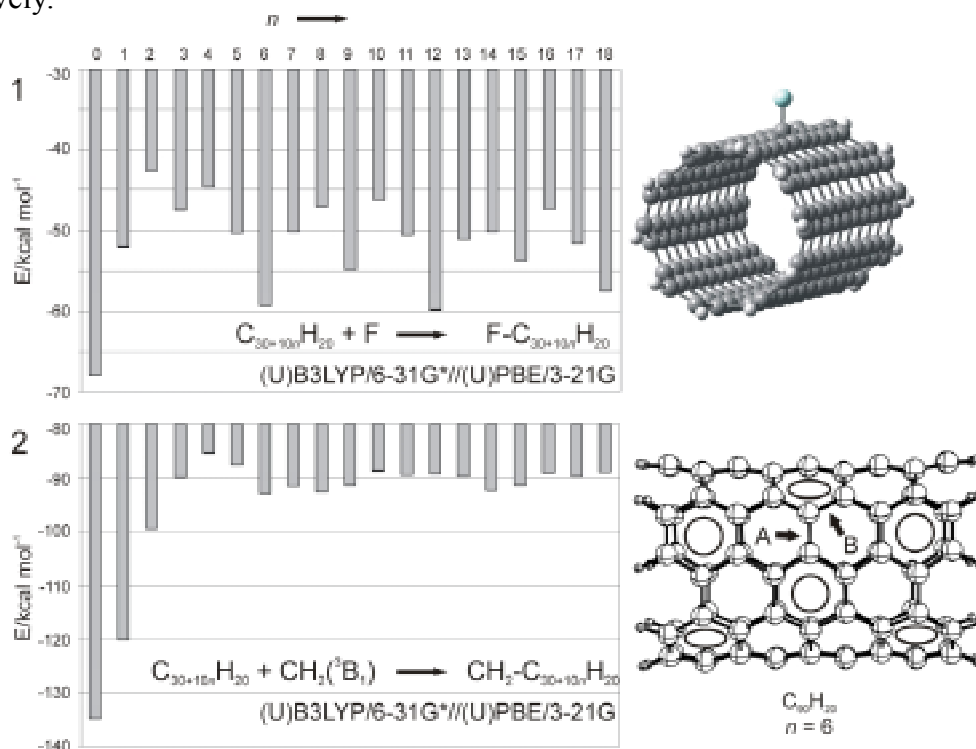
Tel.: ++49-(0)234-3224259; FAX: ++49-(0)234-3214353

email: Holger.Bettinger@ruhr-uni-bochum.de

<http://homepage.ruhr-uni-bochum.de/Holger.Bettinger>

Holger F. Bettinger, *Org. Lett.* **6** (2004) 731-734. Effects of finite carbon nanotube length on the sidewall addition of fluorine atom and methylene.

Density functional computations (PBE and B3LYP) in conjunction with 3-21G and 6-31G* basis sets are used to determine the energy of fluorine atom and CH₂ addition to the sidewall of finite (5,5) C_{30+10n}H₂₀ ($n = 0,1,2,\dots,18$) carbon nanotube slabs. In agreement with the oscillation of the HOMO-LUMO gap, a pronounced oscillation of the addition energy is found for fluorine atom addition (1). Carbene addition results in insertion into the CC bonds, which are oriented circumferentially (A). The resulting products are related to the pristine carbon nanotube by homoconjugation, resulting in significant damping of the oscillation of the addition energy (2). Addition to the other CC bond (B), oriented axially, is significantly less favorable, 29 kcal mol⁻¹ and 12 kcal mol⁻¹, for (5,5) and (10,10) armchair nanotubes, respectively.



Dichtefunktionalrechnungen (PBE und B3LYP) mit den 3-21G und 6-31G* Basissätzen wurden durchgeführt um die Energien für die Addition von Fluoratomen und Methyl an Fragmente von (5,5) Kohlenstoff-Nanoröhren endlicher Länge C_{30+10n}H₂₀ ($n = 0,1,2,\dots,18$) zu bestimmen. Analog der Oszillation des HOMO-LUMO Energieabstandes wird eine ausgeprägte Oszillation der Energie für die Fluoratomaddition erhalten (1). Die Methylenaddition führt zur Insertion in die CC-Bindungen, die entlang des Röhrenumfangs ausgerichtet sind (A). Die resultierenden Produkte sind durch Homokonjugation mit den reinen Kohlenstoff-Nanoröhren verwandt, wodurch die Oszillation der Additionsenergie deutlich gedämpft wird (2). Die Addition an die andere CC-Bindung (B), welche entlang der Röhrenachse ausgerichtet ist, ist energetisch deutlich weniger günstig, nämlich 29 kcal mol⁻¹ und 12 kcal mol⁻¹ für (5,5) und (10,10) Kohlenstoff-Nanoröhren.

Gerald Dyker

Organische Chemie – Organische Synthese und Katalyse;

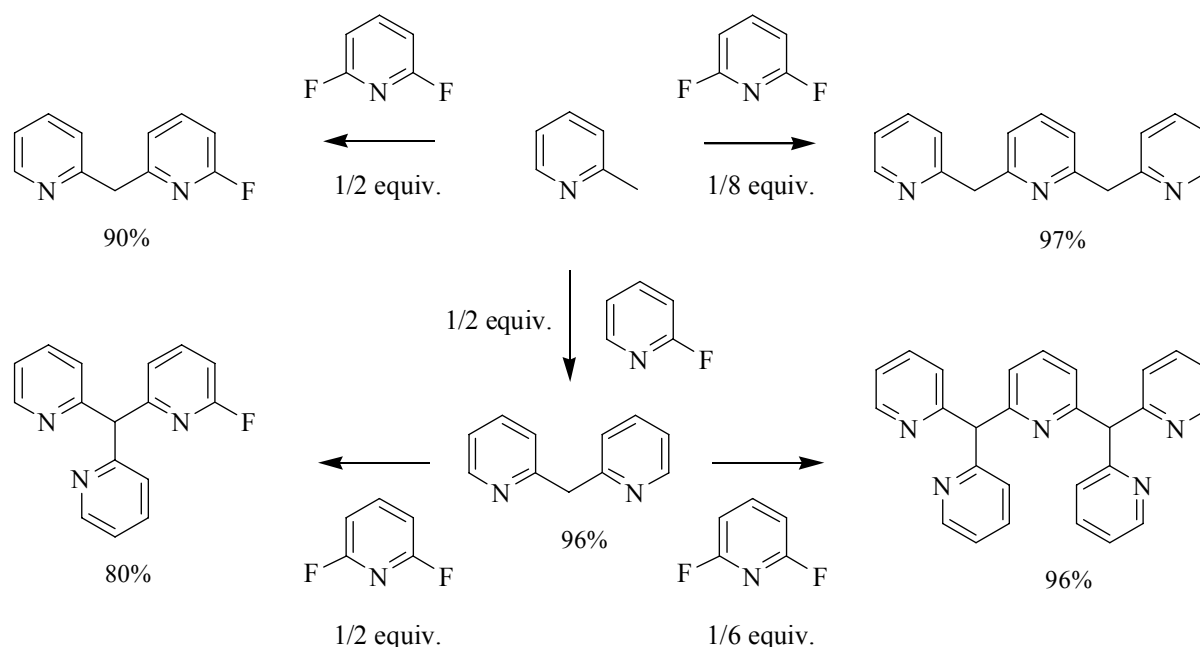
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

G. Dyker, O. Muth, *Eur. J. Org. Chem.* **2004**, 4319-4322. Synthesis of Methylene- and Methine-Bridged Oligopyridines.

Flexible Oligopyridine, mit den Pyridineinheiten verknüpft über Methylengruppen oder auch längeren Alkandiyl-Ketten, sind faszinierende Liganden für Selbstorganisationsprozesse. Der einfachste Vertreter dieser Oligopyridine, das 2-(2-Pyridylmethyl)pyridin, wird normalerweise durch nukleophile aromatische Substitution mit lithiiertem 2-Methylpyridin als Nukleophil und entweder Pyridin oder 2-Bromopyridin als elektrophile Komponente hergestellt. Wir verbesserten diese Methode erheblich durch den Einsatz von Fluoropyridinen. So sind sogar Pentakispyridine zugänglich, mit Ausbeuten in der Regel über 90 %.



Flexible oligopyridines with the pyridine units linked by methylene groups or even longer alkandiyl chains are fascinating ligands for self-organization processes. The simplest representative of this type of oligopyridines, 2-(2-pyridylmethyl)pyridine, is regularly synthesized by nucleophilic aromatic substitution with lithiated 2-methylpyridine as nucleophile and either pyridine or 2-bromopyridine as electrophilic component. We significantly improved this method by employing fluoropyridines as reaction components. Thus, even pentakispyridines are accessible with yields regularly above 90 %.

Christof Wöll

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

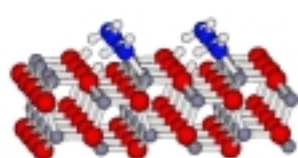
Tel.: ++49-(0)234-3225529; FAX: ++49-(0)234-3214182

email: woell@pc.ruhr-uni-bochum.de

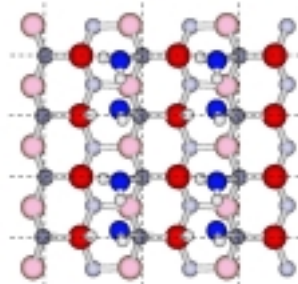
<http://www.pc.ruhr-uni-bochum.de>

B. Meyer, D. Marx, O. Dulub, U. Diebold, M. Kunat, D. Langenberg, Ch. Wöll, *Angew. Chemie*, **116**, (2004), 6810-6814: Partielle Dissoziation von Wasser führt zu stabilen Überstrukturen auf der Oberfläche von Zinkoxid. *Angew. Chemie, Int. Ed.* **43**, (2004), 6642-6645: Partial dissociation of water leads to stable superstructures on the surface of zinc oxide.

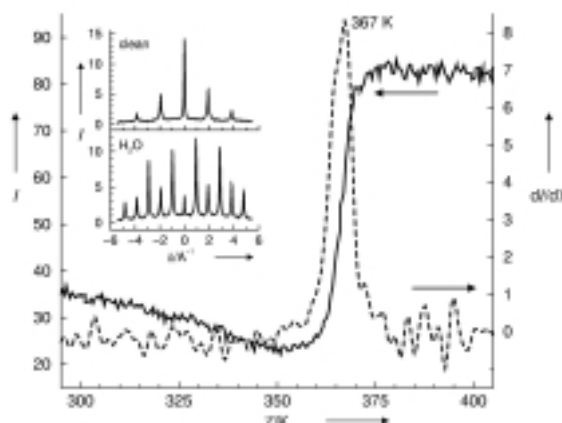
Unter atmosphärischen Bedingungen sind alle Oberflächen Wasser ausgesetzt. Obwohl es sich dabei um ein einfaches, kleines Molekül handelt, kann eine Vielzahl von Phänomenen auftreten. Im letzten Jahr konnte gezeigt werden, dass in einer Monolage Wasser auf der technisch bedeutenden gemischt-terminierten $\text{ZnO}(10\bar{1}0)$ -Oberfläche ein Teil der Moleküle auch bei Temperaturen unter 300 K dissoziiert. Dieses unerwartete Ergebnis wurde mit verschiedenen experimentellen und theoretischen Methoden festgestellt: Elastische Heliumstreuung liefert Schnitte durch das Beugungsbild, aus denen eine (2×1) Überstruktur abgeleitet wird. Auch rastertunnelmikroskopische Aufnahmen und Dichtefunktionalrechnungen ergeben eine Struktur mit dieser Symmetrie. Die Dissoziation von Molekülen wird mit Röntgenphotoelektronenspektroskopie nachgewiesen, die zwei verschiedene OH-Spezies zeigt. Sie ist allerdings reversibel, und nur intakte Moleküle desorbieren. Abschließend wird ein quantitatives Verständnis in Molekulardynamikrechnungen gewonnen, die eine spontane Dissoziation jedes zweiten Wassermoleküls und dadurch erst die Bildung der (2×1) Struktur zeigen.



Links: Halb-dissoziierte (2×1) Lage Wasser/ ZnO
(Rechnungen: Meyer, Marx, Theoretische Chemie)



Rechts: He-Beugungsbilder und He-Signal bei Desorption. Das Auftreten nur eines Peaks zeigt, dass die Moleküle wieder intakt desorbieren.



Under atmospheric conditions all surfaces are exposed to water. Although it is a small, simple molecule, a large number of phenomena can occur. In the past year it was shown that part of the molecules in a water monolayer on the technically important mixed-terminated $\text{ZnO}(10\bar{1}0)$ -surface dissociates already at temperatures below 300 K. This unexpected result was obtained by employing several experimental and theoretical methods: From the diffraction of helium atoms, a (2×1) superstructure can be concluded, which is confirmed by scanning tunnelling microscopy and calculations using density functional theory. The dissociation of the water molecules is evidenced from two different OH peaks in X-ray photoelectron spectra. However, it is reversible, and only intact molecules leave the surface. A quantitative understanding is achieved via molecular dynamics simulations, which show spontaneous dissociation of every second water molecule and the resulting formation of a (2×1) structure.

Gregor Witte

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

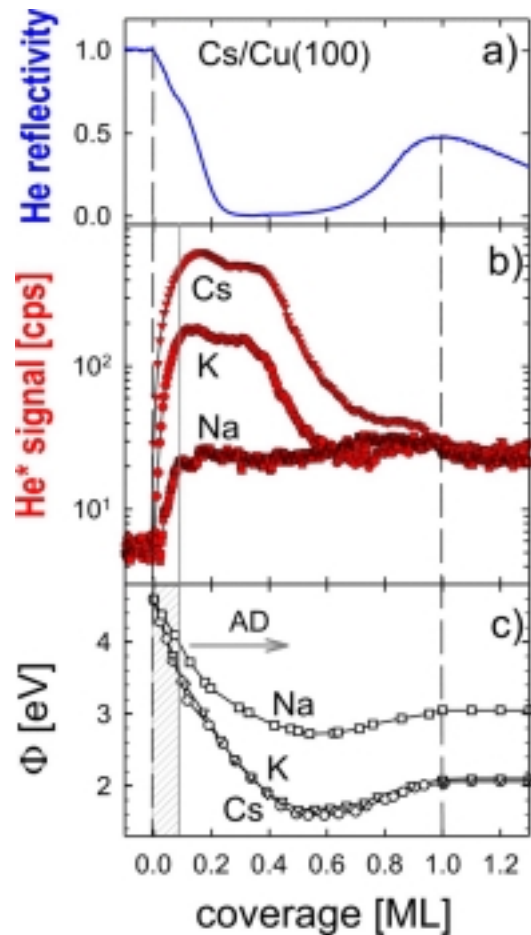
Tel.: ++49-(0)234-32 24222; FAX: ++49-(0)234-32 14182

email: witte@pc.rub.de

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

G. Witte, *J. Phys: Condens. Matter* **16**, S2937 (2004). Probing metallization transitions by metastable He-atom scattering

The survival probability of metastable He* atoms scattered from low work function materials depends sensitively on the electronic surface density of states which was utilized to characterize the degree of metallicity of ultrathin alkali metal (AM) films. By combining metastable He-atom scattering (MHAS) with He-atom scattering (HAS) to monitor the film growth, the coverage dependence of the metallization was studied. In this paper the metallization transition obtained for various AM (Na, K, Rb, Cs) and Ba films grown on Cu(100) and GaAs(100) surfaces are compared. It is shown that the onset of metallization observed for K, Cs and Ba on Cu(100) is in close agreement with a critical coverage estimated from a simple 2D Herzfeld model. Moreover, MHAS was also used to investigate the demetallization of ultrathin AM films upon adsorption of O₂ or CO.



Die Überlebenswahrscheinlichkeit metastabil angeregter He*-Atome während der Streuung an Festkörperoberflächen mit sehr geringer Austrittsarbeit hängt entscheidend von der elektronischen Zustandsdichte der Oberfläche ab. Diese Abhängigkeit kann dazu genutzt werden, um den Grad der Metallisierung während des Wachstums ultradünner Alkalimetall-Filme zu charakterisieren. Durch gleichzeitige Kombination mit He-Atomstreuung kann das Filmwachstum verfolgt werden, was damit eine genaue Bedeckungsabhängigkeit solcher Metallisierungsübergänge ermöglicht. In diesem Artikel werden Metallisierungsübergänge verglichen, die beim Wachstum verschiedener Alkalimetall- (Na, K, Rb, Cs) und Ba-Filme auf Cu(100)- und GaAs(100)-Oberflächen beobachtet wurden. Es zeigt sich, dass der Einsatz der Metallisierung von dünnen K-, Cs- und Ba-Filmen auf Cu(100) gut durch ein einfaches 2D Herzfeld-Modell beschrieben werden kann. Darüber hinaus erlaubt die Streuung metastabiler He-Atome auch die Charakterisierung der Demetallisierung dünner Metallfilme infolge der Adsorption von O₂ oder CO.

Christian Herrmann

Physikal. Chem. 1 – Protein-Interaktionen; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

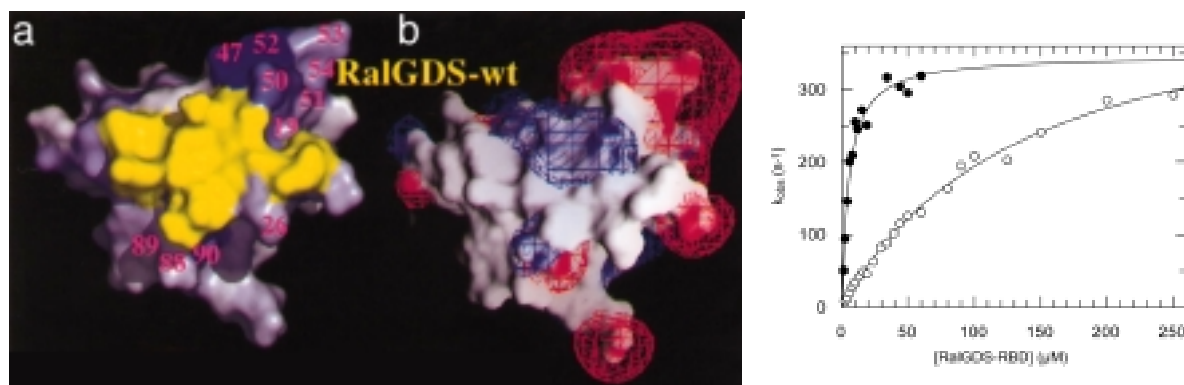
Tel.: ++49-(0)234-3224173; FAX: ++49-(0)234-3214785

email: chr.herrmann@ruhr-uni-bochum.de

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

C. Kiel, T. Selzer, Y. Shaul, G. Schreiber, C. Herrmann, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **101**, (2004) 9223-9228. Electrostatically optimized Ras-binding Ral guanine dissociation stimulator mutants increase the rate of association by stabilizing the encounter complex.

Die Assoziation zweier Proteine erfolgt in zwei Schritten: Der Bildung eines losen Begegnungskomplexes folgen das Abstreifen der Wasserhülle und Konformationsänderungen bestimmter Proteinteile, die zum endgültigen, festen Komplex führen. Wir konnten zeigen, dass der erste Schritt in guter Näherung mit einem elektrostatischen Modell zu beschreiben ist. Auf dieser Grundlage wurden Mutationen in der Peripherie der Proteinkontaktfläche (Bild links) eingeführt, für die das Modell ein verbessertes „elektrostatisches Lenken“ bei der Begegnung der Proteine voraussagt. Eine schnellere Assoziation der Proteine und damit eine höhere Stabilität des Komplexes sind die Folge (Bild rechts). Der Vergleich der berechneten und experimentellen Geschwindigkeitskonstanten zeigt eine sehr gute Übereinstimmung und unsere Erkenntnisse erlauben eine weite Anwendung auf andere Systeme. Der Vergleich verwandter Proteine wie zum Beispiel die Effektoren von Ras zeigt, dass die Natur nach diesem Konzept Varianten von Proteinen designed hat, um Affinität und Dynamik von Proteinkomplexen den biochemischen Funktionen und biologischen Erfordernissen anzupassen.



Association of two proteins can be described as a two-step process, with the formation of an encounter complex followed by desolvation and establishment of a tight complex. Here we designed, using the computer algorithm *PARE*, a set of mutants of the Ras effector protein RalGDS with optimized electrostatic steering (figure on the left). The fastest binding RalGDS mutant, M26K,D47K,E54K, binds Ras 14-fold faster and 25-fold tighter compared to wild-type (fig. right). A linear correlation was found between the calculated and experimental data, with a correlation coefficient of 0.97 and a slope of 0.65 for the 24 mutants produced. The data suggest that increased electrostatic steering specifically stabilizes the encounter complex and transition state. This conclusion is backed up by Φ analysis of the encounter complex and transition state of the RalGDS/Ras complex, with both values being close to 1. Upon further formation of the final complex, the increased Coulombic interactions are probably counterbalanced by the cost of desolvation of charges, keeping the dissociation rate constant almost unchanged. The binding constants of the faster binding RalGDS mutants towards Ras are similar to those of Raf, the most prominent Ras effector, suggesting that the design methodology may be used to switch between signal transduction pathways.

Friedrich Stuhl

Laser- und Luftchemie; Physikalische Chemie I, Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226713; FAX: ++49-(0)234-3216713

email: Friedrich.Stuhl@ruhr-uni-bochum.de

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/agstuhl/>; <http://www.irs.titech.ac.jp/stuhl.html>

Th. Martin and F. Stuhl, *J. Phys. Chem. A*, **108**, (2004) 1741-1745. Energy transfer from $\text{NH}(a^1\Delta, v)$ to $\text{O}_2(X^3\Sigma_g^-)$: Kinetics of Single Vibrational States.

Energieübertragungsreaktionen von elektronisch angeregten Molekülen wurden bisher nur selten in Abhängigkeit von ihrer Schwingungsanregung und Temperatur untersucht. Wir haben die Kinetik der Reaktion $\text{NH/ND}(a^1\Delta, v=0-3) + \text{O}_2(X^3\Sigma_g^-) \rightarrow \text{NH/ND}(X^3\Sigma^-, v) + \text{O}_2(b^1\Sigma_g)$ für die Isotopomere NH- und ND-Radikale im elektronisch angeregten, metastabilen a-Zustand untersucht und Aktivierungsenergien bestimmt. Diese Reaktion ist praktisch Energie resonant und verläuft mit der Ausbeute von ungefähr eins. Die Daten in Figure 1 und 2 legen nahe, dass dieser Prozess adiabatisch bezüglich niedriger Schwingungsquanten-anregung unter Bildung von $\text{NH/ND}(X, v)$ verläuft. Der energetisch höchste Zustand $\text{NH}(a, v=3)$, den wir untersuchen konnten, ist eine Ausnahme.

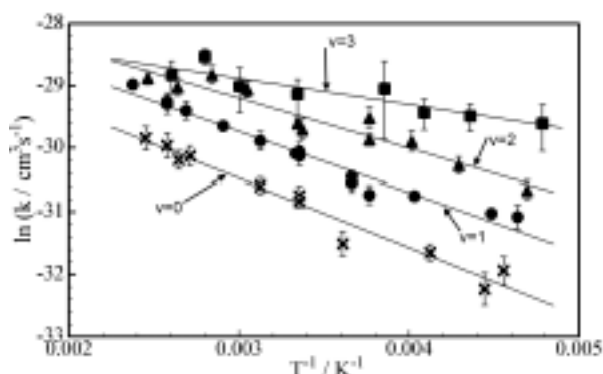


Figure 1. Arrhenius plot for the quenching of $\text{NH}(a, v)$

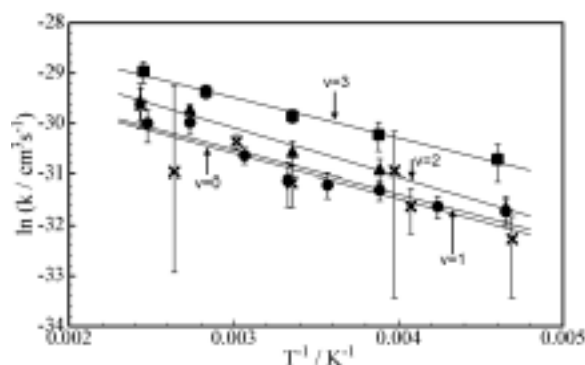


Figure 2. Arrhenius plot for the quenching of $\text{ND}(a, v)$

There are not many studies of energy transfer reactions of electronically excited molecules as a function of their vibrational excitation and temperature. We have studied the kinetics of the reaction $\text{NH/ND}(a^1\Delta, v=0 \text{ to } 3) + \text{O}_2(X^3\Sigma_g^-) \rightarrow \text{NH/ND}(X^3\Sigma^-, v) + \text{O}_2(b^1\Sigma_g)$ for the isotopomers NH- and ND-radicals in their electronic, metastable a-state in the temperature range 209 – 421 K. As a result, we have obtained activation energies. This energetically resonant reaction proceeds with a yield of about one. The data of Figures 1 and 2 and further work indicate adiabaticity with respect to low vibrational levels generating $\text{NH/ND}(X, v)$. The energetically highest vibrational level $\text{NH}(a, v=3)$, which we were able to study, appears to be an exception to this behavior.

Martina Havenith-Newen

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

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

email: Martina.Havenith@ruhr-uni-bochum.de

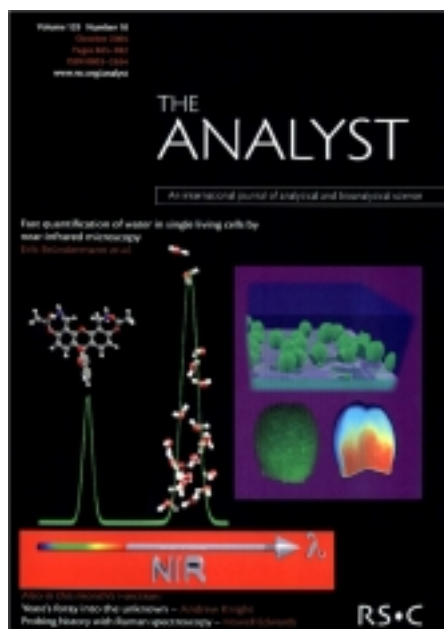
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/pc2>

E. Bründermann, A. Bergner, F. Petrat, R. Schiwon, G. Wollny, I. Kopf, H. de Groot and M. Havenith, *Analyst*, 2004, 129, 893. Fast quantification of water in single living cells by near-infrared microscopy,

Für die Funktion von Zellen ist es maßgeblich, wie viel Wasser sie enthalten. Der Wassergehalt beeinflusst z.B. die Produktion bzw. den Abbau von Proteinen und anderen Zellbestandteilen. Funktioniert die Zelle aufgrund von zuviel oder zuwenig Wasser nicht mehr richtig, können verschiedene Krankheiten, wie Diabetes inipidus oder Grauer Star entstehen. Mit der Entwicklung eines neuartigen Infrarotmikroskops, steht nun erstmalig eine zerstörungsfreie Methode für die quantitative Bestimmung des intrazellulären Wassergehaltes von lebenden Zellen zur Verfügung.

Im Gegensatz zu bisherigen Verfahren wie z.B. Fluoreszenzmikroskopie oder ^1H -NMR ist diese Methode quantitativ und labelfrei und braucht damit keine störenden Einflüsse von Farbstoff- oder Markermolekülen zu fürchten. Als erste Anwendung wurden Leberzellen von Ratten untersucht.

Eine erhöhte Konzentration von Wirkstoffen (z.B. Insulin) im Wasser führt zu einer Erhöhung des osmotischen Druckes in den Zellen und zu einer reversiblen Änderung des relativen Wassergehaltes in den Zellen. Einen vergleichbaren Effekt erzielt man durch die in der Abbildung gezeigte Variation der Pufferkonzentration des die Zellen umgebenden Mediums. Die Weiterentwicklung der Methode zielt auf die Echtzeitbeobachtung des Einflusses minimaler Dosen von pharmazeutischen Wirkstoffen auf Einzelzellniveau. Sie birgt damit ein enormes Potential für zukünftige medizinische Anwendungen.



The water concentration in cells affects the function of the cell, e.g. the build up and decomposition of proteins and other cell components. A malfunction of the cell's water balance may cause diseases like diabetes inipidus and cataract. With the development of a new infrared microscope, for the first time a non-destructive method is available which allows the quantitative determination of the intracellular water concentration in living cells. In contrast to other methods, like fluorescence microscopy and ^1H -NMR, this method is label-free and quantitative showing no interference of dye or marker molecules. As first application rat liver cells were investigated. Cells shrink and swell to different extents when the incubation buffer concentrations were varied. The resulting osmotic pressure hanges illustrate the effects that biochemicals (insulin) have on the water concentration in cells.

Further developments of the method aim on monitoring the influence of minimum dosages of pharmaceuticals at the single cell level in real-time yielding an enormous potential for medical applications.

Hermann Weingärtner

Physikalische Chemie II - Physikalische Chemie der Flüssigkeiten

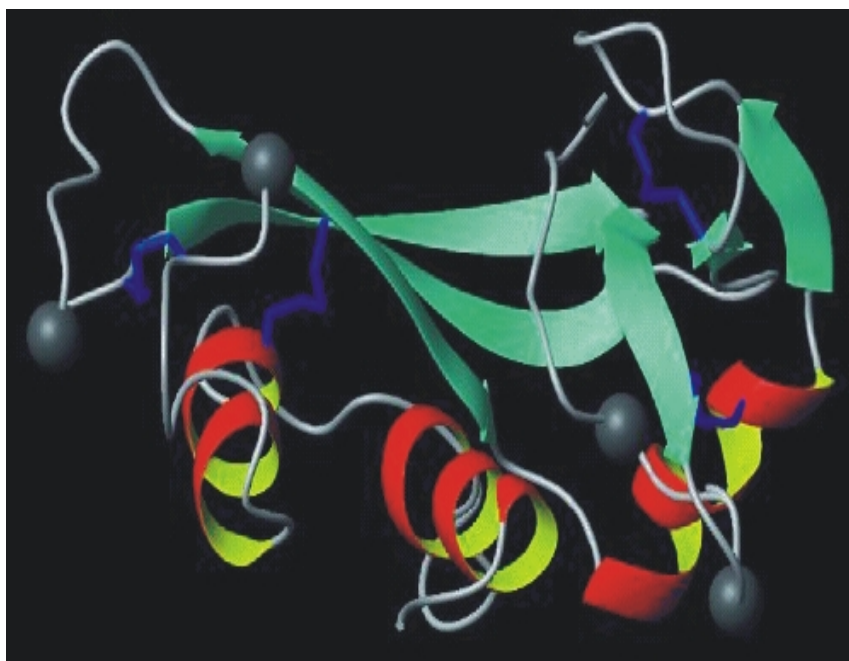
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-325535; FAX: ++49-(0)234-3214193

email: hermann.weingaertner@rub.de

A. Oleinikova, P. Sasisanker, H. Weingärtner *J. Phys. Chem.* **108** (2004) 8467-8474. What can really be learnt from dielectric spectroscopy of protein solutions. A case study of ribonuclease A.

Dielektrische Spektroskopie liefert wichtige Informationen über die molekulare Dynamik und Struktur von Lösungen und wird vermehrt auch zum Studium biomolekularer Systeme eingesetzt. Neuere experimentelle Entwicklungen erlauben nun die Aufnahme dielektrischer Spektren über weite Frequenzbereiche vom kHz- bis ins GHz-Gebiet mit sehr hoher spektraler Auflösung. Mit Hilfe solcher Experimente wurde am Beispiel der Ribonuclease A erstmals eine Analyse dynamischer dielektrischer Prozesse in Proteinlösungen auf der Zeitskala von Mikrosekunden bis Pikosekunden mit sehr hoher Auflösung durchgeführt und eine Bandenzuordnung vorgenommen. Es wurde gezeigt, dass dielektrische Spektroskopie wichtige Informationen über die Hydratation der Proteine liefern kann.



Dielectric spectroscopy provides important information on the molecular dynamics and structure of solutions and is increasingly used for studying systems of biochemical interest. New experimental developments allow now the record of dielectric spectra over a wide frequency range from the MHz to the GHz region with very high resolution. Such experiments were now used in a case study of the dielectric relaxation of protein solutions, using ribonuclease A as a representative protein. Dielectric processes were observed and assigned with high resolution at the time scale from microseconds to picoseconds. It was shown that dielectric spectroscopy provides important information on protein hydration.

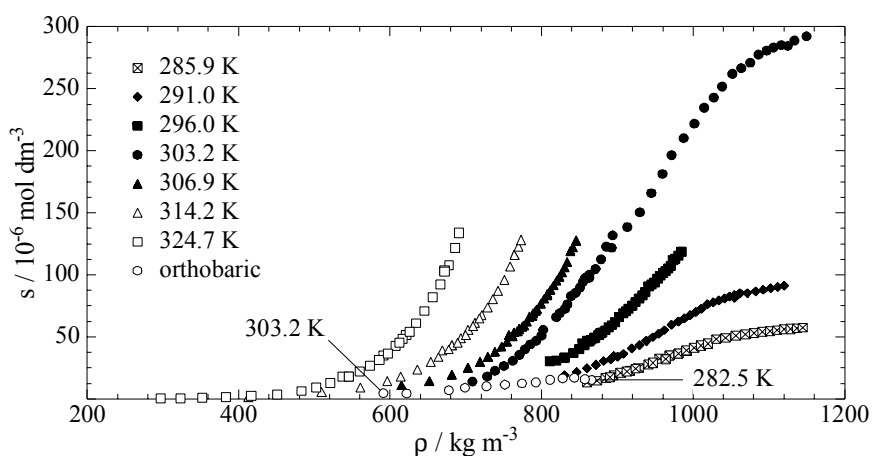
Gerhard M. Schneider

Physikalische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum; Tel.: ++49-(0)234-3224250; Fax: ++49-(0)234-3214293.

e-mail: gerhard.schneider@ruhr-uni-bochum.de

D. Tuma, B. Wagner and G.M. Schneider, in: *Supercritical Fluids as Solvents and Reaction Media*, G. Brunner, ed., Elsevier 2004, p.121 – 146. High-pressure solubility measurements of solids in near- and supercritical fluids.

Der vorliegenden Arbeit, die von der DFG gefördert wurde, gingen Untersuchungen zur Textilfärbung mit Dispersionsfarbstoffen aus überkritischem Kohlendioxid in Zusammenarbeit mit dem Deutschen Textilforschungszentrum Nord-West e.V. in Krefeld voraus. Bereits bei diesen Färbexperimenten ergab sich die Notwendigkeit, die Löslichkeit der benutzten Dispersionsfarbstoffe systematisch zu vermessen. Geplant waren spektroskopische Präzisionsmessungen über weite p, ρ, T -Bereiche mit CO_2 und anderen überkritischen Lösungsmitteln. Die benutzten Anthrachinonfarbstoffe stellen Modellsysteme dar, da sie sehr stabil sind und die spektroskopische Bestimmung auch sehr kleiner Konzentrationen erlauben. Die Abbildung zeigt die Löslichkeit von 1,4-Bis-(octylamino)-9,10-anthrachinon in CO_2 in Abhängigkeit von der Dichte bei verschiedenen Temperaturen sowie zusätzlich in der flüssigen Phase entlang der Dampfdruckkurve (orthobare Bedingungen). Bei niedrigen Temperaturen treten Wendepunkte in den Kurven auf, die auf Maxima in den Löslichkeitskurven bei hohen Dichten hinweisen, die von praktischem und theoretischem Interesse sind.



Our investigations which were supported by DFG have been preceded by experiments on textile dyeing with dispersion dyestuffs in supercritical carbon dioxide in cooperation with the Deutsches Textilforschungszentrum Nord-West e.V. at Krefeld, Germany. Already in those experiments, where dyeing has been performed under definite p, T -conditions, the necessity has arisen to investigate the solubility of those dispersion dyestuffs systematically. We have planned our experiments to get highly precise equilibrium solubility data over large p, ρ, T ranges with CO_2 and other supercritical solvent fluids. The anthraquinone dyestuffs used are very stable and allow the spectroscopic determination of very small concentrations. The figure shows the solubility of 1,4-bis-(octylamino)-9,10-anthraquinone in CO_2 as a function of density at different temperatures and additionally in the liquid phase along the vapor pressure curve (orthobaric). At low temperatures inflexion points on the curves are found, giving evidence for maxima in the solubility curves at high densities that are of practical and theoretical interest.

W. S. Sheldrick

Lehrstuhl für Analytische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

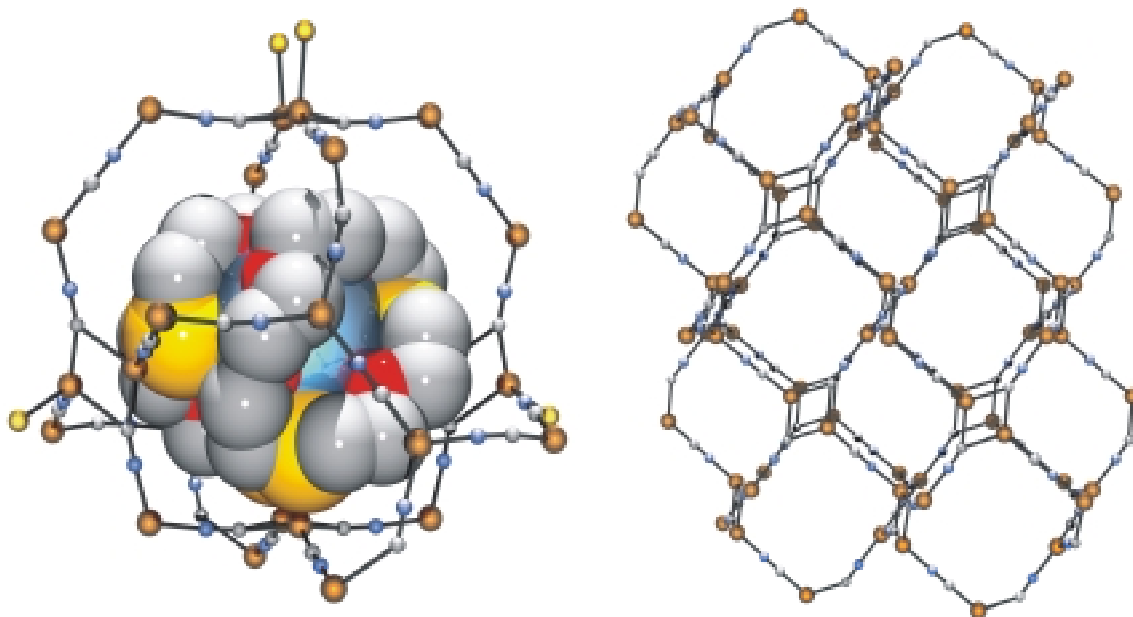
Tel: ++49(0)234-3224192; Fax: ++49-(0)234-3214420

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

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

M. Heller, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **630** (2004) 1191 - 1195. Bimetallic copper(I)-mercury(II) and copper(I)-potassium(I) coordination polymers with bridging di- and trithiacrown ethers.

Thiakronenether sind ambi- und multidentate Liganden, die sich sowohl für die analytische als auch für die industrielle Trennung von Metallionen eignen, nachdem sie an festen Trägern gebunden sind. Neulich konnten wir zeigen, dass solche Makrozyklen auch als Brückenliganden für den Aufbau von Alkalikationen koordinierenden 2- und 3-dimensionalen Hybridmaterialien mit Kupfer(I)-Halogeniden und –Pseudohalogeniden sich verwenden lassen. Diese Arbeit beschreibt ein neuartig verschachteltes Raumnetz mit wabenartigen Cu(I)-Hg(II)-Cyanidschichten, die sich durch die Thiakronenether eines senkrechten Netzwerkes einfädeln. In einem Koordinationspolymer steuern sandwichartige Bis(thiakronenether)-kalium(I)-Einheiten den Aufbau des abgebildeten offenen $\left[\left\{ \text{Cu}_6(\text{CN})_7 \right\} \right]^-$ -Raumnetzes und bleiben nachher in den voluminösen $[\text{Cu}_{26}(\text{CN})_{28}]^{2-}$ -Käfigen eingeschlossen.



Thiacrown ethers are ambi- and multidentate ligands suitable for both analytical and large-scale industrial separations of metal ions following attachment to solid supports. We have recently demonstrated that such macrocycles can also be employed as bridging ligands for the construction of 2- and 3- dimensional composite materials containing copper(I) halides and pseudohalides. The present work describes a novel interpenetrating 3D framework in which honeycomb-like Cu(I)-Hg(II) cyanide sheets thread through the thiakrown ether rings of a perpendicular polymeric layer. In a Cu(I)-K(I) coordination polymer, bis(thiakrown ether)potassium(I) sandwich units direct the formation of the depicted open $\left[\left\{ \text{Cu}_6(\text{CN})_7 \right\} \right]^-$ framework and remain encapsulated in its voluminous $[\text{Cu}_{26}(\text{CN})_{28}]^{2-}$ cages.

Wolfgang Schuhmann

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

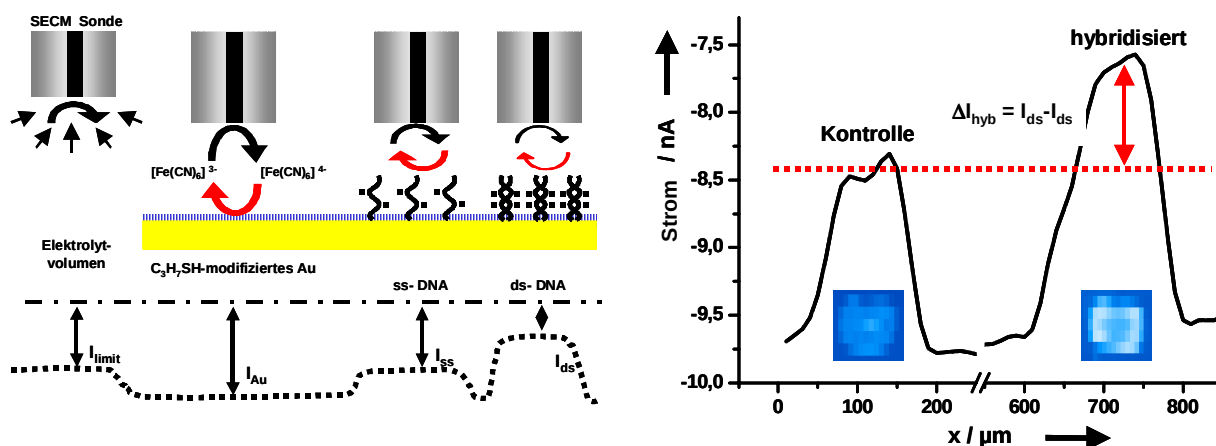
Tel.: ++49-(0)234-3226200; FAX: ++49-(0)234-3214683

email: Wolfgang.Schuhmann@ruhr-uni-bochum.de

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

F. Turcu, A. Schulte, G. Hartwich, W. Schuhmann, *Angew. Chem.* **116** (2004) 3564-3567. Markerfreie elektrochemische Detektion von DNA-Hybridisierung durch Modulation des Feedbackstroms in der elektrochemischen Rastermikroskopie. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **43** (2004) 3482-3485. Label-free electrochemical recognition of DNA hybridization by means of modulation of the feedback current in SECM

Der vorgeschlagene Abstoßungsmodus in der elektrochemischen Rastermikroskopie (SECM) ermöglicht die marker-freie elektrochemische Detektion der Anwesenheit und der Hybridisierung von Oligonucleotiden, die auf der Oberfläche eines DNA-Chips immobilisiert sind. Die Detektion von einzelsträngiger und doppelsträngiger DNA mittels SECM beruht auf der elektrostatischen Abstoßung zwischen den deprotonierten Phosphatgruppen am Rückgrad der Oligonucleotide und einer frei diffundierenden, negativ geladenen Redoxspezies (z.B. $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$). In Elektrolyten mit geeigneter Ionenstärke und pH-Wert hat diese Coulomb-Wechselwirkung einen starken Einfluß auf die Diffusionseigenschaften des Redoxmediators in unmittelbarer Nachbarschaft der oberflächen-gebundenen DNA-Stränge. Die Wechselwirkung zwischen den gleichnamigen Ladungen moduliert die Geschwindigkeit des Massentransfers zur Elektrodenoberfläche an DNA-modifizierten Bereichen und führt damit zu einer Verringerung des amplifizierten Recyclingstromes durch die positionierte Mikroelektrode des SECM.



The proposed repelling mode of scanning electrochemical microscopy (SECM) allows label-free electrochemical recognition of the presence and hybridization of oligonucleotides that are immobilized on conducting DNA chips. Basically, the SECM-based detection of single and double-stranded DNA profits from the electrostatic repulsion between deprotonated phosphate groups at the backbone of the oligonucleotides and a free-diffusing negatively charged redox mediator (e.g. $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$). In electrolytes of proper pH and ionic strength, this coulomb interaction is heavily influencing the diffusion properties of the mediator in the vicinity of the surface-anchored DNA strands. This charge interaction modulates the mass transfer kinetics of the charged redox species in the DNA modified regions, and thus locally decreases the positive feedback currents measured with a SECM tip placed within the electrochemical near-field of the chip surface.

Peter Zinn

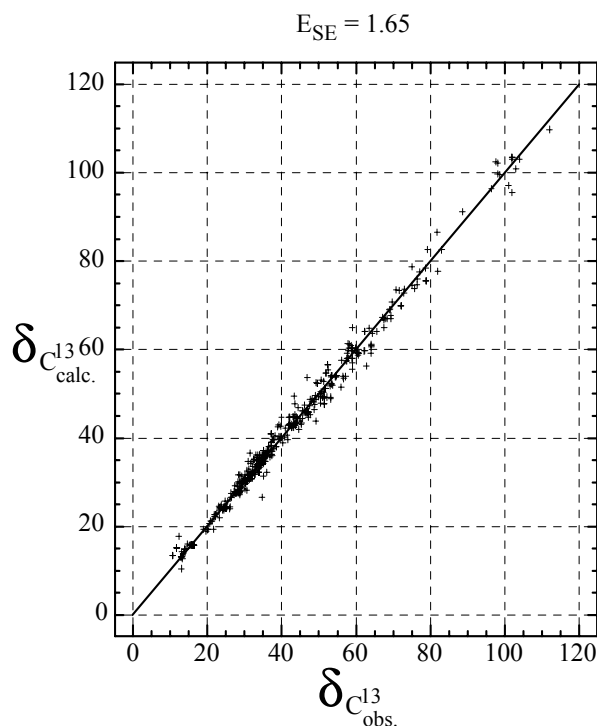
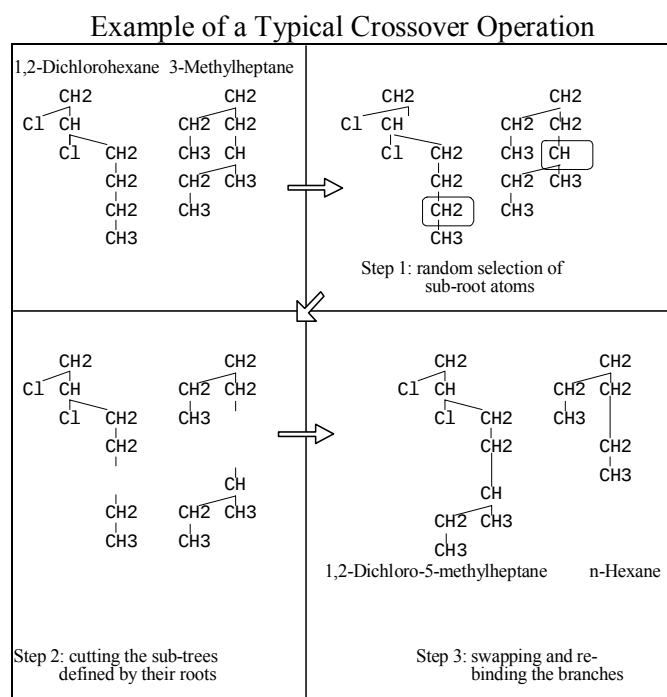
Lehrstuhl für Analytische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224193; FAX: ++49-(0)234-3214420

peter.zinn@ruhr-uni-bochum.de

Th. Blenkins, P. Zinn *CCA* **77** (2004) 213-219. Applying Genetic Algorithms in Structure Elucidation of Halogenated Alkanes Considering Corresponding ^{13}C NMR Spectra.

Strukturen chemischer Verbindungen können aus ihren spektralen Eigenschaften mit Hilfe genetischer Algorithmen abgeleitet werden. Dazu wurde eine hierarchische Notation entwickelt, die formale genetische Operationen wie Kreuzung, Mutation und Selektion an chemischen Strukturen ermöglicht. Das Verfahren wurde für halogenierte Alkane implementiert und mit ^{13}C -Spektren getestet. Zunächst wird das Spektrum einer Probesubstanz gemessen. Um eine Struktur diesem Spektrum zuzuordnen wird eine Startgeneration von Strukturen zufällig erzeugt und die zugehörigen Spektren mit einem ^{13}C -Spektrengenerator berechnet. Der Vergleich der Spektren mit dem Probespektrum und die Anwendung der genetischen Operationen führen zur Verbesserung der Strukturerkennung der Probe von Generation zu Generation.



A new concept for structure elucidation using genetic algorithms is introduced. In analogy to the genetic programming paradigm developed by Koza this concept supports genetic operations on hierarchically coded chemical line notations. The implementation starts with the random generation of a population of chemical compounds. Then the physical property of each compound of the population is predicted and compared with the observed property of the unknown compound. The result is a fitness value for each compound. Depending on the fitness values the candidates for the next generation are selected by a spinning wheel procedure. In the last step these candidates are rearranged by genetic mutation and crossover to form the next generation. The described procedure is repeated until the spectrum of one candidate is almost equal to the spectrum of the unknown compound within acceptable tolerances. The introduced concept is verified for halogenated alkanes. The basis of the fitness function is a ^{13}C -spectrum generator developed from a data sample of 118 compounds including 651 ^{13}C -shifts with a resulting prediction error of 1.65 ppm within a range of 10 and 110 ppm. The resulting prediction model includes 29 significant topological descriptors and allows correct classifications with a quota of better than 80 %.

Iris Müller

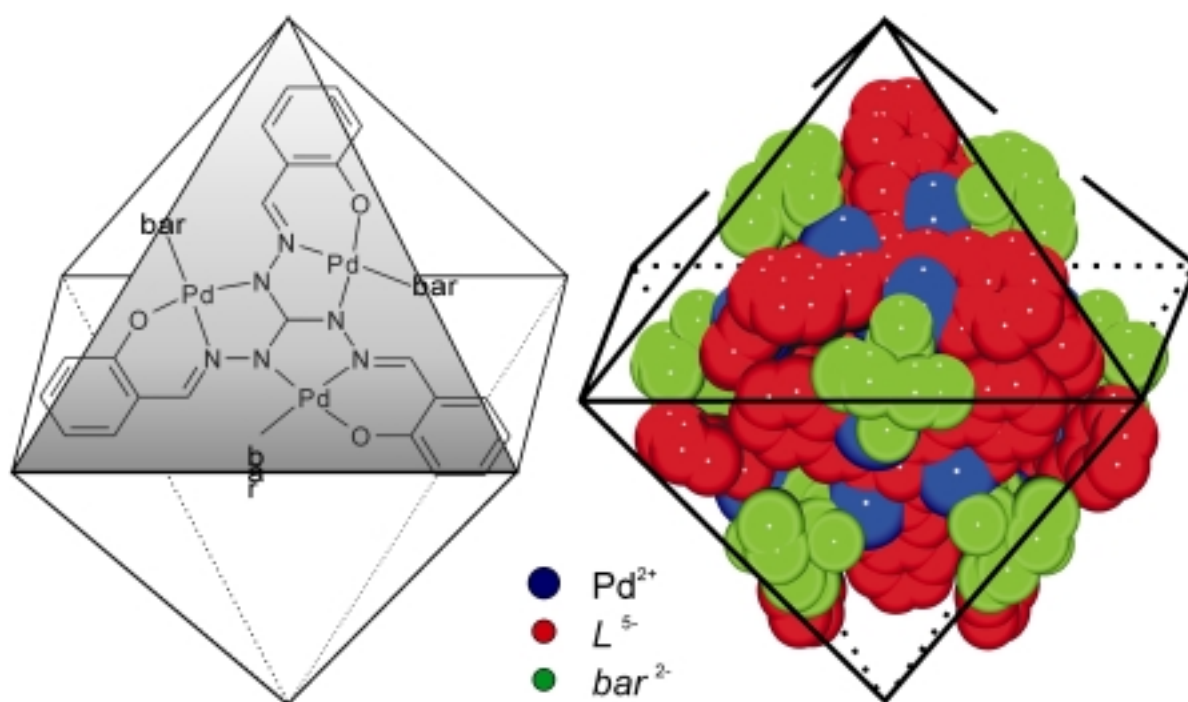
Lehrstuhl für Analytische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224193; FAX: ++49-(0)234-3214420

iris.m.mueller@ruhr-uni-bochum.de

I. M. Müller, S. Spillmann, H. Franck, R. Pietschnig; *Chem. Eur. J.* 2004, 10, 2207. Rational Design of the First Closed Coordination Capsule with Octahedral Outer Shape

In der Veröffentlichung wird die gezielte Synthese eines Koordinationskäfigs mit der äußeren Gestalt eines Oktaeders beschrieben, in dem die Flächen der Kapsel vollständig durch dreifach chelatisierende, C_3 -symmetrische Liganden belegt werden. Die Verwendung von quadratisch planar koordinierenden Pd(II)-Zentren führt zu einer freien Koordinationsstelle auf der Mitte der Kante, welche durch einen zusätzlichen Verbrückungsliganden belegt wird. Hierfür haben wir 5,5-Diethylbarbiturat verwendet, welches einen Verbrückungswinkel aufweist, der gleich dem Diederwinkel in einem idealen Oktaeder ist.



Schematische Darstellung und Röntgenstruktur des oktaedrischen Anions $[(\text{Pd}_3\text{L})_8(\mu\text{-bar})_{12}]^{16-}$.

Das chirale Käfiganion weist eine Höhe von 2,85(8) nm bei einer Kantenlänge von 2,02(8) nm auf. Das Innenvolumen beträgt etwa $1600 \text{ \AA}^3$ und ist durch vier Na^+ Ionen und etwa 20 Wassermoleküle belegt. Zur weiteren Ladungskompensation dienen zwölf Et_3NH^+ -Kationen außerhalb des Käfigs, welche fehlgeordnet mit Lösungsmittelmolekülen ein Volumen von etwa $5200 \text{ \AA}^3$ beanspruchen. Die Charakterisierung erfolgte durch ^{13}C -MAS-NMR und Röntgenstrukturanalyse.

Raphael Stoll

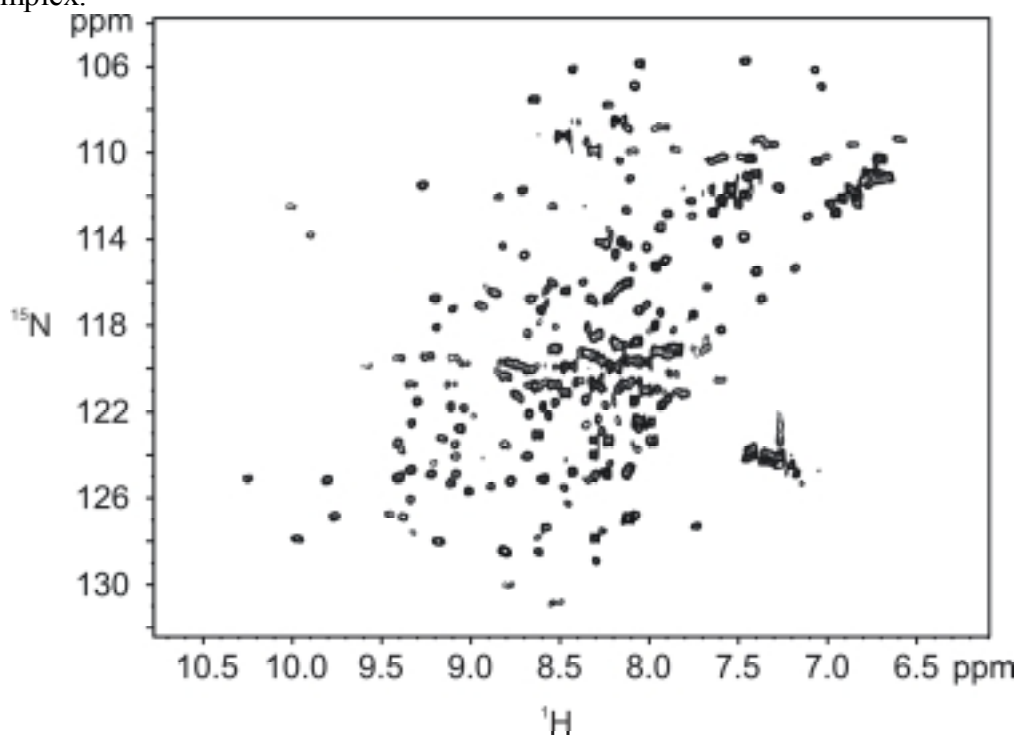
Anal. Chem. / Biochemie II; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: Raphael.Stoll@ruhr-uni-bochum.de

Nowaczyk, M., Berghaus, C., Stoll, R. & Rögner, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6** (2004), 4878-4881. Preliminary structural characterisation of the 33 kDa protein (PsbO) in solution studied by site-directed mutagenesis and NMR spectroscopy.

Site-directed mutagenesis experiments combined with 1D and 2D NMR spectra provide a preliminary insight into the structure and dynamics of the 33 kDa protein (PsbO) from *T. elongatus* free in solution. The NMR spectra suggest that PsbO rather than forming a 'molten globule' state or being 'natively unfolded', contains both a well folded core and highly flexible regions. This core shows remarkable stability over a broad range of temperatures and pH values. Additional experiments with Cys residues introduced at different positions indicate sites of increased accessibility/flexibility which may be important for the docking to the PS2 core complex.



600 MHz ^1H - ^{15}N HSQC-Spektrums des WT-PsbO bei pH 3,6 und 310 K. Die Dispersion der Amidprotonen-Signale zeigt, dass PsbO in Lösung gefaltet vorliegt.

Mittels ortsgerichteter Mutagenese sowie ein- und zweidimensionaler NMR-Spektroskopie wurde die Struktur und Dynamik des 33 kDa-Proteins PsbO aus *T. elongatus* in Lösung charakterisiert. Die NMR-Spektren zeigen, dass das PsbO in Lösung nicht als 'molten globule' oder als 'nativ ungefaltetes' Protein vorliegt, sondern sowohl struktururierte als auch flexible Bereiche aufweist. PsbO zeichnet sich durch eine ausserordentlich hohe Stabilität über weite Temperatur- und pH-Bereiche aus. Zusätzliche Experimente mit Cystein-Punktmutanten, die an verschiedenen Positionen des PsbO-Proteins eingefügt wurden, zeigen, dass einige loop-Bereiche eine erhöhte Flexibilität besitzen. Diese könnten eine wichtige Rolle bei der Bindung des PsbO-Proteins an den PS2-Kernkomplex spielen.

Dominik Marx

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

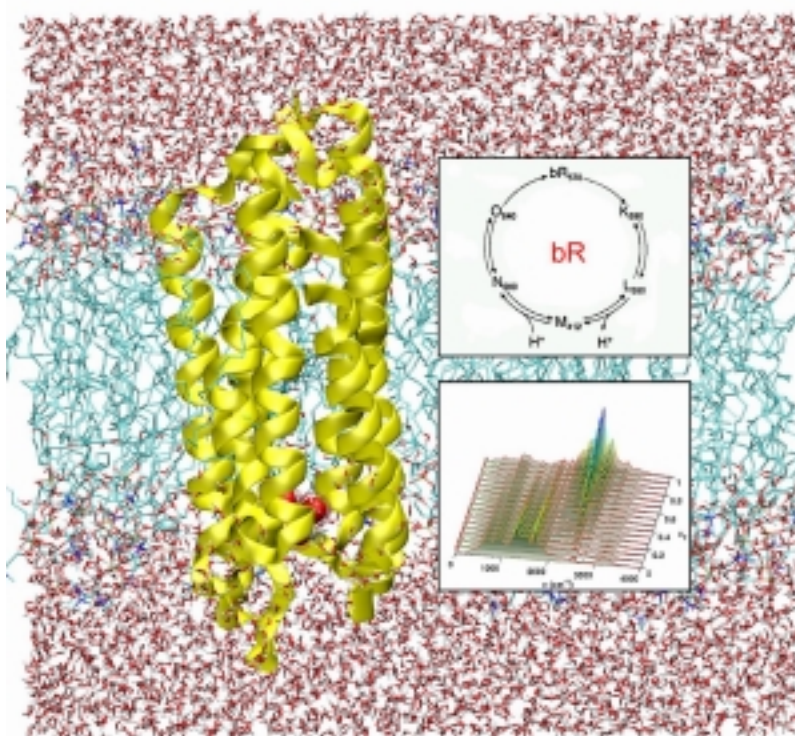
Tel.: ++49-(0)234-3228083; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: Dominik.Marx@theochem.rub.de

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

R. Rousseau, V. Kleinschmidt, U.W. Schmitt, D. Marx, *Angew. Chem.* **116** (2004) 4908-4911. Zuordnung der Protonierungsmuster von Wassernetzwerken in Bakteriorhodopsin mittels berechneter Infrarotspektren. *Angew. Chem. Int. Ed.* **43** (2004) 4804-4807. Assigning Protonation Patterns in Water Networks in Bakteriorhodopsin Based on Computed IR Spectra.

Die Car-Parrinello-Technik ermöglicht die Simulation zweier protonierter Wasserstoffbrückennetzwerke im Inneren der Protonenpumpe Bakteriorhodopsin. Die berechneten Infrarotspektren zeigen komplementäre Absorptionskontinua - ein Ergebnis, das für die zeitaufgelöste spektroskopische Untersuchung des Protonentransfers auf molekularer Ebene wegweisend sein könnte.



Simulations relying on the Car-Parrinello technique were used to study two types of protonated hydrogen-bonded networks inside the proton pump bacteriorhodopsin. The computed infrared spectra exhibit complementary absorption continua, a finding that could possibly open the door to time-resolved spectroscopic probes of proton transport on a molecular level.

Hintergrundinformation zu Modell und Simulationsmethodik:

Phys. Chem. Chem. Phys. **6** (2004) 1848-1859. Modeling protonated water networks in bacteriorhodopsin.

Mediathek des Lehrstuhls mit weiteren Glanzlichtern:

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

Nikos L. Doltsinis

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

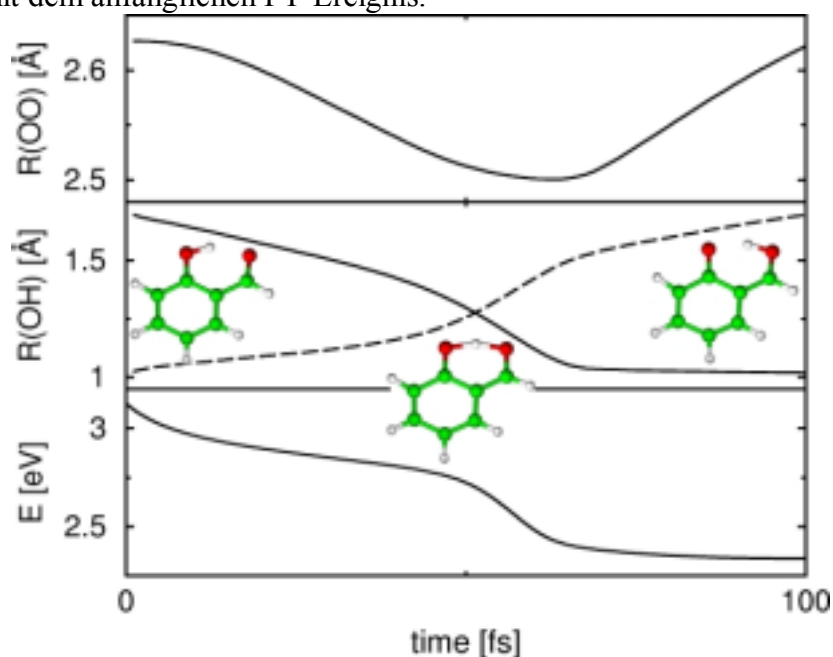
Tel.: ++49-(0)234-3226749; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: Nikos.Doltsinis@theochem.ruhr-uni-bochum.de

<http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de/~nikos.doltsinis>

N. L. Doltsinis. *Mol. Phys.* **102** (2004) 499-506. Excited state proton transfer and internal conversion in o-hydroxybenzaldehyde: new insights from nonadiabatic *ab initio* molecular dynamics

Photoangeregtes o-Hydroxybenzaldehyd wurde mithilfe einer kürzlich entwickelten, nichtadiabatischen *ab initio* Molekuldynamik-Methode, die den elektronisch angeregten S_1 -Zustand mit dem Grundzustand durch ein Surface Hopping-Verfahren koppelt, untersucht. Vertikale Anregung des *enol*-Tautomers in den $\pi\pi^*$ -Zustand führt zu spontanem Protonentransfer (PT) und dadurch zur Bildung des *keto*-Tautomers. Der PT-Prozess wird vollständig durch die Atmungsmode des H-Chelatrings getrieben. Es existiert in der Tat keine Barriere für den PT im S_1 -Zustand. Der strahlungslose Zerfall des nach $\pi\pi^*$ angeregten *keto*-Tautomers durch interne Konversion (IC) wird auf der Pikosekunden-Zeitskala beobachtet. Die Wahrscheinlichkeit für einen nichtadiabatischen Übergang vom S_1 - zurück in den Grundzustand ist korreliert mit der Atmungsmode des H-Chelatrings sowie mit der zeitlichen Änderung der Methoxy-OH Bindungslänge. Es gibt Anzeichen für eine erhöhte IC-Rate in Verbindung mit dem anfänglichen PT-Ereignis.



A recently developed nonadiabatic *ab initio* molecular dynamics method coupling the S_1 excited electronic state to the ground state by a surface hopping technique has been applied to study photoexcited o-hydroxybenzaldehyde. Vertical excitation of the *enol* tautomer to the $\pi\pi^*$ state leads to spontaneous proton transfer (PT) and thus formation of the *keto* tautomer. The PT process has been found to be entirely driven by the breathing mode of the H-chelate ring. In fact, there exists no barrier for PT in the S_1 state. Nonradiative decay of the $\pi\pi^*$ excited *keto* tautomer through internal conversion (IC) is observed on a picosecond timescale. The probability for a nonadiabatic surface hop from the S_1 state back to the ground state is seen to be correlated to the chelate ring breathing mode and to the temporal changes in the methoxy OH bond length. There are indications of an increased IC rate associated with the initial PT event.

Bernd Meyer

Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum

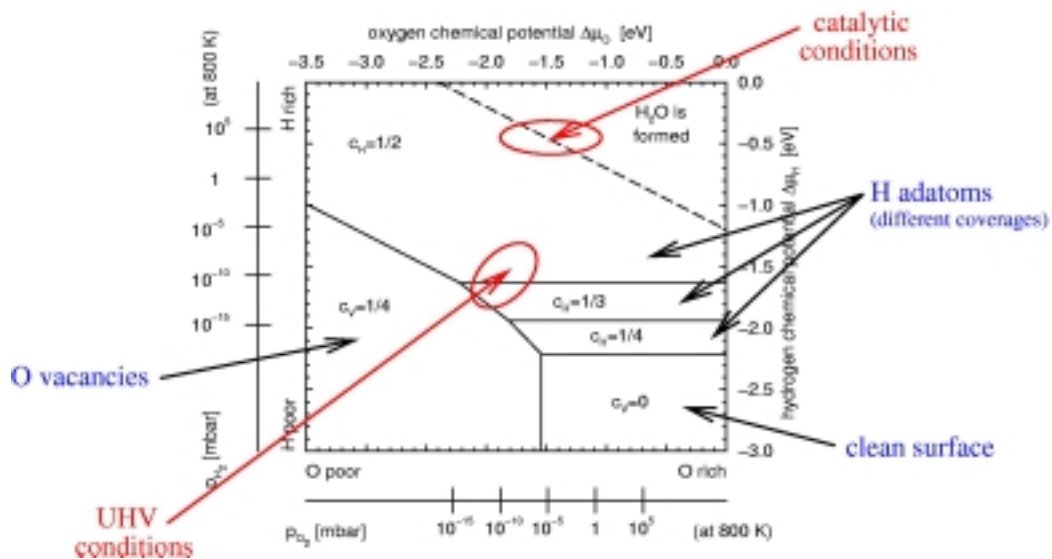
Tel.: +49-(0)234-322-6750, Fax: +49-(0)234-321-4045

Email: bernd.meyer@theochem.ruhr-uni-bochum.de

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

B. Meyer, *Phys. Rev. B* **69**, 045416 (2004). First-principles study of the polar O-terminated ZnO surface in thermodynamic equilibrium with oxygen and hydrogen

Die Dichtefunktionaltheorie (DFT) ist eine sehr leistungsfähige Methode zur Berechnung von Grundzustandseigenschaften von Oberflächen im Vakuum bei $T=0$ und $p=0$. Um jedoch Prozesse in der heterogenen Katalyse besser verstehen zu können, ist ein detailliertes Wissen über die Struktur und Zusammensetzung von Katalysatoroberflächen in Kontakt mit umgebenden Gasphasen bei endlichen Temperaturen und Drücken notwendig. Adsorptions- und Desorptionsprozesse finden statt, die in einer theoretischen Beschreibung berücksichtigt werden müssen. Durch die Kombination von DFT-Rechnungen mit einem thermodynamischen Formalismus wurden für das konkrete Beispiel der polaren O-terminierten ZnO(000-1)-Oberfläche die stabilsten Oberflächenstrukturen bei endlichen Temperaturen und Drücken bestimmt. Das Ergebnis ist ein Phasendiagramm von Gleichgewichts-Oberflächenstrukturen für einen weiten Bereich von Umgebungsbedingungen, die vom Ultrahochvakuum bis zu technisch relevanten Temperaturen und Drücken in katalytischen Reaktionen reichen.



Density-functional theory (DFT) is a very powerful tool for calculating zero-temperature and zero-pressure ground-state properties of surfaces. However, for a better understanding of processes in heterogeneous catalysis, detailed knowledge of the structure and composition of the catalyst surfaces in contact with surrounding gas phases at finite temperatures and pressures is required. Adsorption and desorption processes take place and have to be taken into account. For the specific example of the polar O-terminated ZnO(000-1) surface, the most stable surface structures at elevated temperatures and pressures have been determined by combining DFT calculations with a thermodynamic formalism. The result is a phase diagram of equilibrium surface structures ranging from ultra-high vacuum conditions to technically relevant temperatures and pressures in catalytic reactions ("bridging the pressure gap").

Volker Staemmler

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

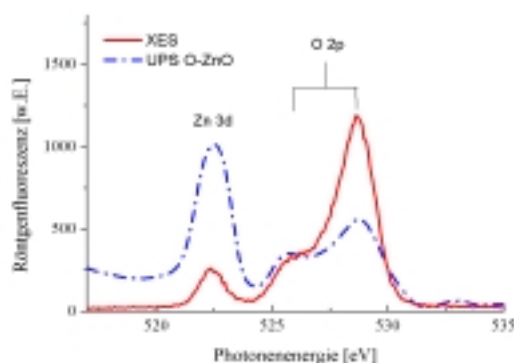
Tel.: ++49-(0)234-3226752; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: Volker.Staemmler@theochem.ruhr-uni-bochum.de

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

T. Strunskus, O. Fuchs, L. Weinhardt, C. Heske, M. Guraya, M. Muhler, V. Staemmler, Ch. Wöll. *J. Electr. Spectrosc. Relat. Phenom.* **134**, 183 (2004). The Valence Electronic Structure of Zinc Oxide Powders as Determined by X-ray Emission Spectroscopy: Variation of Electronic Structure with Particle Size

Spektroskopische Experimente mit Röntgen-Strahlen (Röntgen-Photoelektronen-, Röntgen-Absorptions- und Röntgen-Emissions-Spektren) liefern detaillierte, elementaufgelöste Informationen über die geometrische und elektronische Struktur von Festkörpern, Festkörperoberflächen und an ihnen adsorbierten Molekülen. Allerdings benötigt die Interpretation solcher Spektren die Hilfe genauer quanten-chemischer ab initio Rechnungen. In dem unten gezeigten Beispiel wurden die elektronischen Zustände von ZnO-Einkristallen im Energiebereich der Valenzelektronen mit der (nicht elementspezifischen) UV-Photoelektronen-Spektroskopie (UPS) und der (elementspezifischen) Röntgen-Emission-Spektroskopie (XES) an der O1s-Kante untersucht. Die ab initio Rechnungen erklären zwanglos den großen Unter-



Experimental UPS and O(1s) XES spectra of ZnO

schied zwischen den gemessenen UPS und XES Spektren sowie den Ursprung der verschiedenen Intensitätsmaxima: Im XES Spektrum dominiert die Emission aus den O2p-Orbitalen; sie zeigt bei 526 eV eine durch Bandstruktureffekte hervorgerufene Schulter und wegen der starken Mischung zwischen O2p und Zn3d Orbitalen einen Satelliten bei 522 eV. Pulverproben mit ZnO-Nanokristalliten zeigen aufgrund ihrer größeren Oberfläche im XES Spektrum charakteristische Unterschiede zu ZnO Einkristallen.

X-ray spectroscopy (X-ray photoelectron, X-ray absorption, and X-ray emission spectroscopy) is one of the most powerful tools to get detailed, element specific information about the geometrical and electronic structure of solids, solid surfaces and adsorbed molecules. However, the interpretation of X-ray spectra requires the help of accurate quantum chemical ab initio calculations. The electronic states of ZnO single crystals in the energy range of the valence bands have been studied in the above example by means of (non element specific) UV photoelectron spectroscopy (UPS) and (element specific) X-ray emission spectroscopy (XES) at the O1s edge. The ab initio calculations are able to explain the large differences between the experimental UPS and XES spectra and to understand the origin of the different intensity maxima: The emission from O2p orbitals is dominant in the XES spectrum; the shoulder at 526 eV is caused by band structure effects, the satellite peak at 522 eV by an admixture of Zn3d orbitals to the O2p orbitals. Because of their large surface areas, ZnO powder samples containing ZnO nanoparticles exhibit in their XES spectra characteristic differences to ZnO single crystals.

Martin Muhler

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

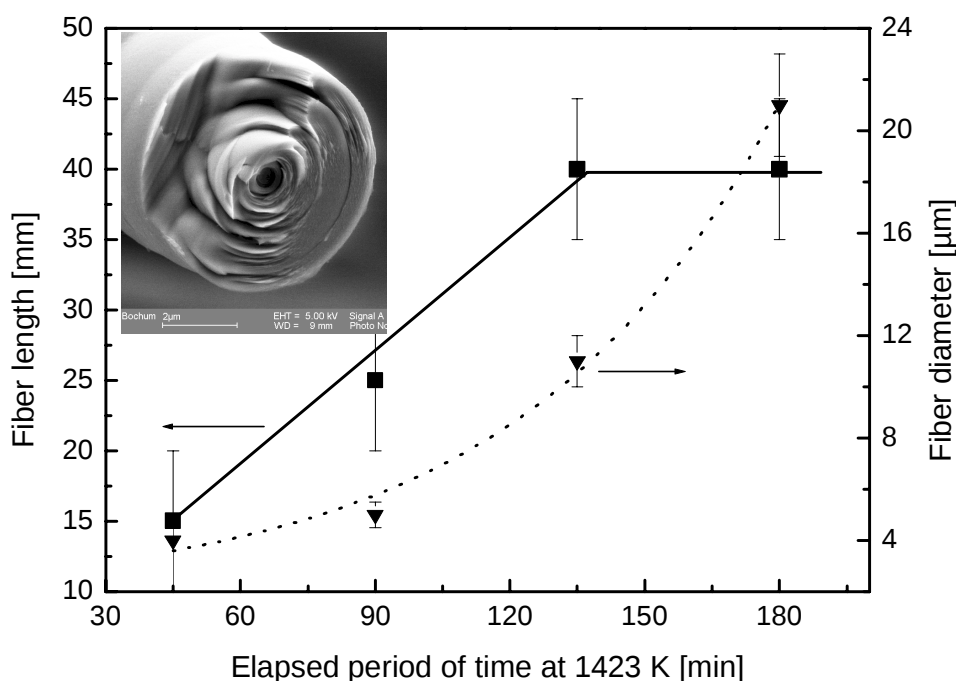
Tel.: ++49-(0)234-3228754; FAX: ++49-(0)234-3214115

email: muhler@techem.ruhr-uni-bochum.de

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

O.F.-K. Schlüter, B.I. Wehner, D. Hu, W. Xia, T. Quandt, G. Marginean, W. Brandl and M. Muhler. *Appl. Catal. A: General* **274** (2004) 71-77. The iron-catalyzed synthesis of carbon microfibers from methane: the influence of growth conditions on conversion, selectivity, morphology and structure of the fibers.

Die eisenkatalysierte Methanzerersetzung wurde eingesetzt, um hochgeordnete Kohlenstoff-Mikrofasern (VGCF, *vapor-grown carbon fibers*) wachsen zu lassen. Diese wurden eingehend mit SEM, TG, XRD und Raman-Spektroskopie charakterisiert. Der Umsatz an Methan und die Selektivität zu den Mikrofasern wurde als Funktion der Prozessparameter untersucht, sodass das katalytische Längenwachstum bei niedrigeren Temperaturen von der pyrolytischen Verdickung bei höheren Temperaturen unterschieden werden konnte. Das SEM-Bild zeigt die typische Kern-Schale-Struktur.



Carbon microfibers were synthesized from hydrogen-diluted methane over an iron catalyst and characterized by scanning electron microscopy, thermogravimetry, X-ray diffraction, and Raman spectroscopy. The conversion of methane and the overall selectivity of carbon fiber formation were derived reproducibly as a function of the growth conditions. Blank experiments and experiments with different iron loadings helped to identify the catalytic methane decomposition at about 1270 K, whereas the pyrolysis of methane dominated at higher temperatures leading to a core-and-shell structure of the fibers. Prolonged growth using a $\text{CH}_4/\text{H}_2 = 30/70$ mixture at 1423 K for 8 h resulted in a diameter of more than 20 μm and a length approaching a limit of about 40 mm. The growth mode was found to depend strongly on the gas-phase composition and the temperature. By lowering the methane content to 10%, or by lowering the temperature to 1348 K, nanofibers were obtained.

Kai-Olaf Hinrichsen

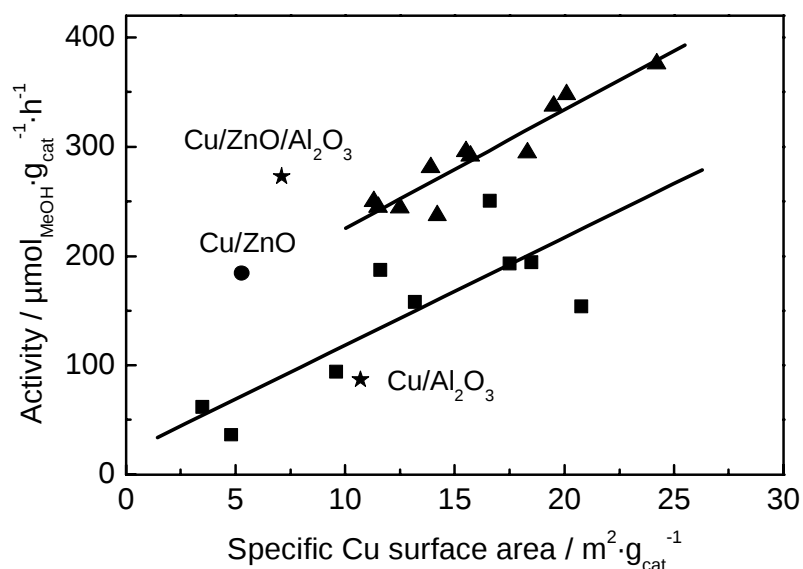
Lehrstuhl für Technische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226907; FAX: ++49-(0)234-3214115

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

M. Kurtz, N. Bauer, C. Büscher, H. Wilmer, O. Hinrichsen, R. Becker, S. Rabe, K. Merz, M. Driess, R.A. Fischer, M. Muhler, *Catal. Lett.* **92** (2004) 49-52. New Synthetic Routes to Cu/ZnO Catalysts Used for Methanol Synthesis.

Es ist uns im Rahmen des Sonderforschungsbereiches SFB 558 in den letzten Jahren gelungen, neue Erkenntnisse zum Cu/ZnO-System für die Methanolsynthese zu gewinnen. Die Durchführung von detaillierten Kinetikstudien unter stationärer und instationärer Reaktionsführung sowie der Einsatz physikalisch-chemischer Charakterisierungsmethoden eröffneten in Zusammenarbeit mit der präparativen anorganischen Chemie neue Synthesewege zu effizienten Methanolsynthese-Katalysatoren und führten zu einem tieferen Verständnis der Funktionsweise des Katalysatorsystems unter Prozessbedingungen.



Area-activity relationship for various Cu-based catalysts. Binary (■) and ternary (▲) catalysts synthesized by coprecipitation; Cu/ZnO (●) by deposition-precipitation; Cu/Al₂O₃ (★) by coprecipitation; Cu/ZnO/ Al₂O₃ (★) by coprecipitation followed by chemical vapor deposition.

In recent years, within the “Sonderforschungsbereich SFB 558”, it has been possible to provide insights concerning the Cu/ZnO system employed in methanol synthesis. Detailed kinetic studies under steady-state and unsteady-state conditions were performed in combination with standard physico-chemical characterisation methods. Thus, in cooperation with inorganic synthesis chemistry, the development of new preparation routes for more efficient methanol synthesis catalysts was possible and a deeper understanding of the functionality of the catalyst system under operating conditions was achieved.

Wolfgang Grünert

Technische Chemie – Struktur/Aktivität heterogener Katalysatoren

Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

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

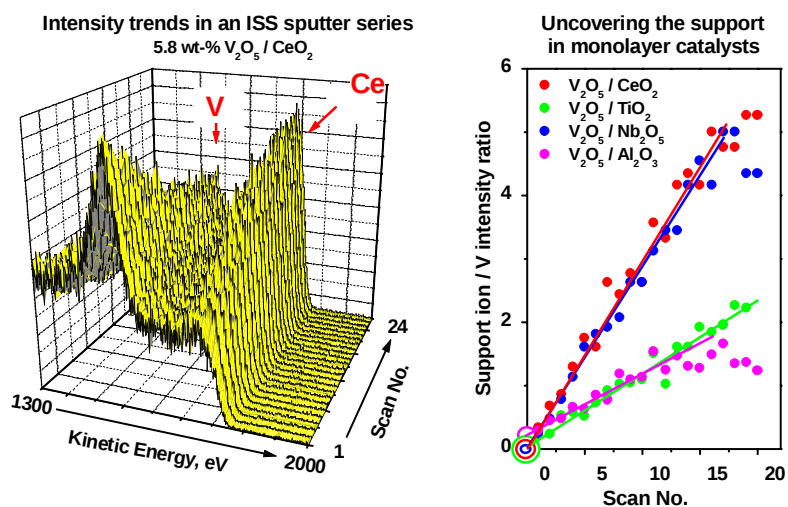
email: Wolfgang.Gruenert@techem.rub.de

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

L. E. Briand, O. P. Tkachenko, M. Guraya, X. Gao, I. E. Wachs, W. Grünert, *J. Phys. Chem. B.* **108** (2004) 4823-4830. Surface-Analytical Studies of Supported Vanadium Oxide Monolayer Catalysts.

L. E. Briand, O. P. Tkachenko, M. Guraya, I. E. Wachs, W. Grünert, *Surf. Interface Anal.* **36** (2004), 238-245. Methodical Aspects in the Surface Analysis of Supported Molybdena Catalysts

Die Oberflächenstruktur von Übergangsmetalloxid-Trägerkatalysatoren war über Jahrzehnte dahingehend strittig, ob der Träger von einer monoatomaren Schicht der Übergangsmetalloxidspezies vollständig abgedeckt wird, bevor bei weiterer Steigerung des Metalloxidgehalts dreidimensionale Aggregate entstehen, oder ob letztere auch in Gegenwart der exponierten Trägeroberfläche gebildet werden. Diese Frage konnte auf der Basis einer neuen Messmethodik mit der Ionenstreuungsspektroskopie (ISS) schlüssig gelöst und frühere konträre Ergebnisse gedeutet werden: In geeignet präparierten V_2O_5 - und MoO_3 -Trägerkatalysatoren wird der Träger im dehydratisierten Zustand komplett von V- bzw. Mo-Oberflächen-Oxidspezies abgedeckt. Hydratisierung der Oberfläche (die schon bei kurzzeitiger Exposition zur Atmosphäre einsetzt) führt zur Ablösung und Aggregation dieser Oberflächenspezies und somit zur Exposition des Trägers.



The surface structure of supported transition-metal oxide catalysts has been a matter of controversy for long, with the focus on the question if the support is covered by a monoatomic layer of surface oxide species before three-dimensional aggregates are formed upon further increase of the metal oxide loading, or if three-dimensional aggregates coexist with the bare support surface. On the basis of a new experimental methodology, this question has been conclusively solved in an ion-scattering spectroscopic (ISS) study, and diverging results have been explained. In appropriately prepared supported V_2O_5 and MoO_3 catalysts, the support surface becomes completely covered with surface V (or Mo) oxide species in the dehydrated state. Hydration, which starts already at short exposure to the ambient atmosphere, leads to detachment and aggregation of the surface oxide species and results, therefore, in exposure of the support surface.

Michael Hollmann

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

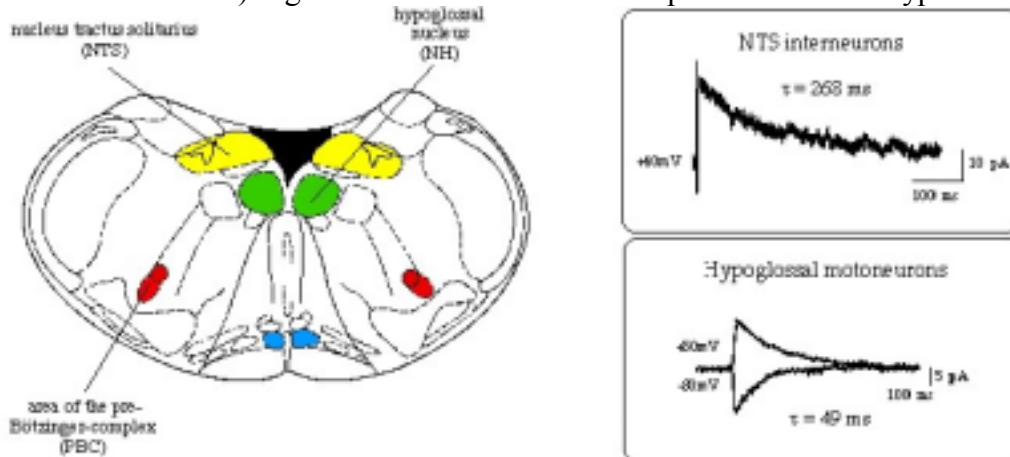
Tel.: ++49-(0)234-3224225; FAX: ++49-(0)234-3214244

email: michael.hollmann@rub.de

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

I. Paarmann, D. Frermann, B.U. Keller, C. Villmann, H.G. Breiteringer, M. Hollmann *Journal of Neurochemistry*, in press. Kinetics and subunit composition of NMDA receptors in respiratory-related neurons.

NMDA-Rezeptoren sind an vielen Hirnstamm-Funktionen beteiligt, so auch an der Generierung des Atemrhythmus. NMDA-Rezeptoren der Interneurone des *präBötzinger-Komplexes* (PBC) und der *Nucleus hypoglossus* (NH)-Motoneurone zeigen erstaunlich schnelle Deaktivierungskinetiken (ca. 29-49 ms) in Vergleich zu NMDA-Rezeptoren z.B. im *Nucleus tractus solitarius* (NTS, 270-320 ms). Da die molekulare Heterogenität der NMDA-Rezeptoruntereinheiten möglicherweise die Grundlage der beobachteten physiologischen Heterogenität ist, untersuchten wir die Expression von 6 NMDA-Rezeptoruntereinheiten (NMDAR1, NR2A, NR2B, NR2C, und NR2D) sowie acht Spleissvarianten von NMDAR1 im PBC, NH und NTS von jungen Ratten mit Hilfe der Einzelzell-Multiplex-RT-PCR-Technik. Während NR2A, NR2B und NR2D in allen Zelltypen exprimiert waren, fand sich NR3A nur im PBC, der zum Rhythmusgenerator der Atemaktivität gehört. In NH-Neuronen wurden die Spleissvarianten NR1-4a und NR1-4b gefunden während im NTS überraschender-weise statt NR1-4b nun NR1-2a detektiert wurde. Diese differentielle Expression von NMDAR1-Spleissvarianten könnte damit die molekulare Basis der divergenten funktionellen (insbesondere kinetischen) Eigenschaften der NMDA-Rezeptoren dieser Zelltypen sein.



NMDA receptors are involved in a variety of brainstem functions such as the generation of breathing rhythms. NMDA receptor currents of preBötzinger complex (PBC) interneurons and nucleus hypoglossus (NH) motoneurons show remarkably fast deactivation kinetics of approximately 30 ms compared to NMDA receptors in the nucleus of the solitary tract (NTS, 320 ms). As NMDA receptor subunit heterogeneity might underlie the observed physiological differences, we examined the expression of six NMDA receptor subunits (NMDAR1, NR2A, NR2B, NR2C, NR2D, and NR3A) plus eight NMDAR1 splice variants in PBC, NH and NTS neurons in young rats using single cell multiplex RT-PCR. Expression of NR2A, NR2B, and NR2D was observed in all three cell types while NR3A was much more abundant in PBC interneurons, which belong to the rhythm generator of respiratory activity. In NH neurons, the NMDAR1 splice variants NMDAR1-4a and NMDAR1-4b were found. In NTS neurons, instead of NMDAR1-4b, the NMDAR1-2a splice variant was detected. This differential expression of modulatory splice variants might be the molecular basis for the characteristic functional properties of NMDA receptors, particularly their distinct deactivation kinetics.

Bernd-Joachim Benecke

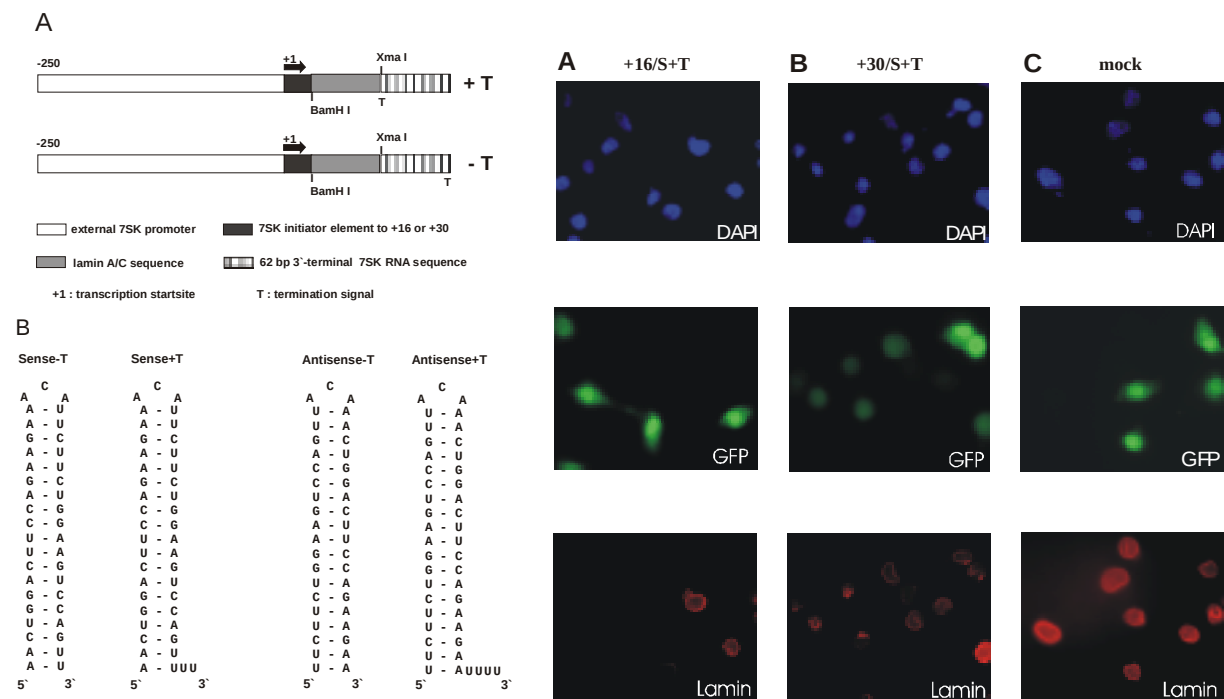
Biochemie I; AG genregulation Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: bernd.benecke@rub.de

D. Koper-Emde, L. Herrmann, B. Sandrock and B.J. Benecke, *Biol.Chem.* **385** (2004) 791-794. RNA interference by small hairpin RNAs synthesized under control of the human 7S K RNA promoter.

Zu den vielfältigen zellulären Aufgaben von RNA Molekülen ist mit der RNA Interferenz eine wichtige regulatorische Funktion hinzugekommen. Dieses post-transkriptionale "gene silencing" stellt einen wichtigen therapeutischen Ansatz im Bereich der RNA Biotechnologie dar. Da RNA Moleküle chemisch und biologisch recht instabil sind, stellt ihre Transfektion in lebende Zellen jedoch ein Hindernis dar. Wir beschreiben daher hier ein Verfahren zur endogenen Synthese solcher siRNA (small interfering RNA) unter Kontrolle eines starken, exogenen RNA Polymerase III Promoters.



oben links: schematische Darstellung der Genkonstrukte

unten links: Sequenzen, Orientierungen und Strukturen der hairpin RNAs

rechts: Analyse von Zellen nach Transfektion. A = +16/sense/mit Terminator;

B = +30/sense/mit Terminator; C = Scheintransfektion mit Plasmid ohne siRNA Sequenz

Blau: Dapi-Färbung der Zellkerne; Grün: Transfektionskontrolle mit GFP (green fluorescent protein); Rot: Analyse auf Lamin Protein mit Fluoreszenz-markiertem Lamin-Antikörper.

Ergebnis: Effizientes Abschalten der endogenen Laminsynthese durch die exprimierten +16 bzw. +30 7S K-hairpin-RNA Genkonstrukte 48 Stunden nach Transfektion.

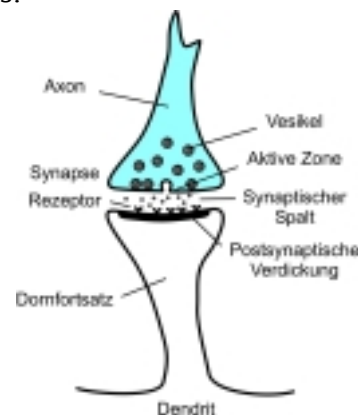
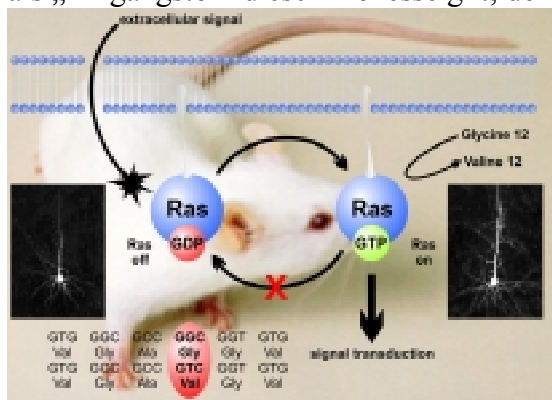
Abstract: Efficient post-transcriptional gene silencing of lamin A/C expression by small hairpin RNAs synthesized under control of the gene-external human 7S K RNA gene promoter.

Rolf Heumann

Biochemie II, Molekulare Neurobiochemie, Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3228230; FAX: ++49-(0)234-321405; email: rolf.heumann@rub.de
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/mol-neurobio/Lehrstuhl/Molneurobio.html>

Arendt, T., Seeger G., Barmashenko G., Palm K., Mittmann T., Li Yan L., Hümmeke M., Behrbohm J., Kamdem R.H. Brückner M.K., Gärtner U., Holzer M., Wahle P., Heumann R. Neuronal activation of Ras regulates synaptic connectivity *Eur J Neurosci.* **19**:2953-66 (2004)

Neurotrophine sind extrazelluläre Proteine des Nervensystems, die in Nervenzellen das Volumen des Zellkörpers, das zelluläre Überleben, das Nervenfasernwachstum, die synaptischen Verknüpfungen und die Effizienz der synaptischen Übertragung steuern. Dazu regen Neurotrophine bestimmte Rezeptortyrosinkinasen an, die Signale in das Innere der Nervenzellen zu leiten. Auf der Suche nach einem zentralen Schalter für die durch Neurotrophine in der Zelle gesteuerten Programme stießen wir auf ein universelles Protein der intrazellulären Signalübertragung: das sog. Ras-Protein (*rat sarcoma*). Wir untersuchten sog. *synRas*- Mäusermutanten, in deren Nervenzellen sich das Ras als Krebsgen im permanent aktivierten Zustand befindet und fanden heraus, dass die einzelnen Nervenzellen vergrößert sind und, dass die Anzahl der synaptischen Verknüpfungen zweifach erhöht ist. Auch die Eigenschaften der synaptischen Übertragung wurden verändert: Die Frequenz der spontanen Ausschüttung von Aktionspotentialen war erhöht und nach einem bestimmten Reizmuster, das eine Koinzidenz der neuronalen Reizung imitierte, war eine langzeitige Potenzierung der synaptischen Übertragung verstärkt. Solche Prozesse werden der Gedächtnisbildung zugeschrieben. Um Gedächtnisprozesse weiter zu entschlüsseln, wenden wir uns nun einer Gehirnregion zu, die als „Eingangstor“ dieser Prozesse gilt, dem *Hippokampus*.



Linkes Bild: Die permanente Aktivierung von Ras als Krebsgen in Nervenzellen führt zu verstärktem Fasernwachstum. Rechts: Elektrochemische Synapse, Maschinenwerke aus dichtgepackten Proteinen

Neurotrophins are extracellular proteins of the nervous system triggering multiple effects such as regulating cell volume, promoting neuronal survival, stimulating neurite outgrowth, enhancing the number of synapses and modulating the efficiency of transmission. Neurotrophins bind to their specific membrane receptor tyrosine kinases activating the universal intracellular signalling protein Ras (*rat sarcoma*). We are investigating transgenic animals (named *synRas* mice) expressing permanently activated human Ha-Ras selectively in neurons by using the promoter for synapsin-1. We show that in these *synRas* mice a) neuronal cell soma volumes were increased as well as their dendritic trees and axonal diameters b) the number of synaptic contacts was two-fold elevated as compared to normal mice c) the spontaneous synaptic release frequencies were stimulated and long-term potentiation was enhanced. Such long-term changes in the efficiency of synaptic transmission are discussed as a correlates of memory processes. We are now proceeding to investigate the hippocampus which is a brain region that is involved in the initial events of memory formation.

Andrea Blöchl

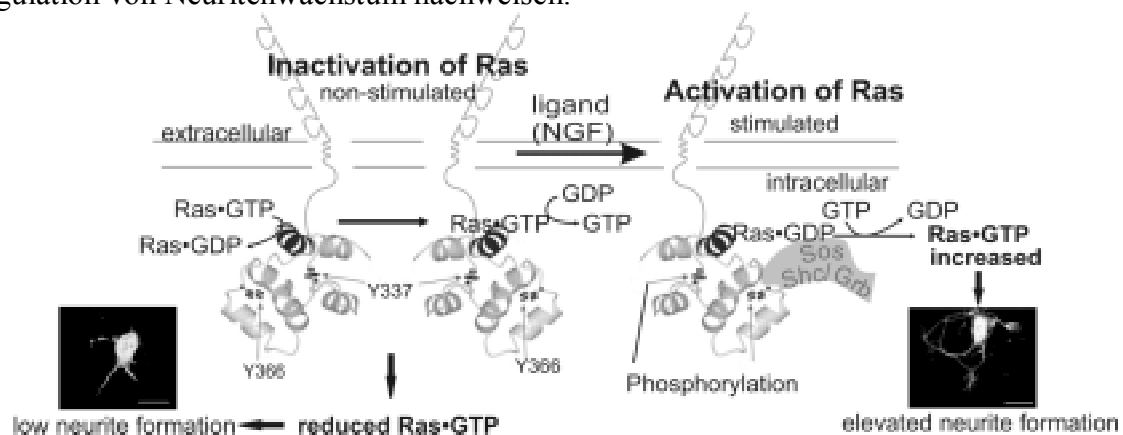
Biochemie II; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226208; FAX: ++49-(0)234-3214105

email: andrea.bloechl@RUB.de

Blöchl, A.; Blumenstein, L., and Ahmadian, R. M. *J. Europ. Neurosci.* **20** (2004) 2321-2335.
Inactivation and activation of Ras by the neurotrophin receptor p75.

Der Neurotrophinrezeptor p75 induziert neurotrophe und apoptotische Signaltransduktionswege. Innerhalb der intrazellulären Domäne des Rezeptors befindet sich eine so genannte „Death Domain“ mit einer vermuteten Bindungsstelle für kleine GTPasen. Wir untersuchten die mögliche Interaktion von p75 und der GTPase Ras. *In vitro* konnten wir eine direkte Interaktion zwischen Ras und der intrazellulären Domäne des Rezeptors nachweisen, wobei das zellbiologisch inaktive Ras·GDP eine höhere Bindungs-Affinität zeigte als das aktivierte Ras·GTP. In einer Enzym-ähnlichen Weise kann dabei der Rezeptor durch seinen unterschiedlichen Einfluss auf die Dissoziation der Nukleotide GTP und GDP von Ras und den Austausch von gebundenem Ras·GDP gegen freies Ras·GTP die GTPase inaktivieren. Mit Hilfe von Mutationsanalyse konnten wir in stabilen Zelllinien die *in vitro* gefundenen Ergebnisse bestätigen und zeigen dass die Ras-Inaktivierungsmechanismus des p75 zu einem deutlich reduzierten Spiegel (ca. 1/3) an aktivem Ras in unstimulierten Zellen führt. Stimulation des Rezeptors mit NGF führt hingegen – unter Beteiligung der Adapter Shc, Grb und Sos - zu einer Ras-Aktivierung. Inaktivierung und Aktivierung von Ras werden durch den Phosphorylierungszustand der beiden intrazellulären Tyrosine des p75 gesteuert. Als einen zellbiologischen Effekt der Ras-Aktivierung über den p75 konnten wir die Regulation von Neuritenwachstum nachweisen.



The neurotrophin receptor p75 induces neurotrophic and apoptotic signalling pathways. Its intracellular part encloses a so-called ‘death domain’ with a segment similar to the wasp venom mastoparan which binds small GTPases such as Rho. To study possible interactions of p75 and Ras (and Rho) we used wild-type and mutant genes of p75 stably expressed by MDCK cells which normally have neither Trk nor p75. We found that p75 can directly bind the GTPases Ras and Rho and that the unstimulated p75 inactivates total cellular Ras through a differential influence on the dissociation of GDP and GTP from Ras and an exchange of bound Ras·GDP for free Ras·GTP. Stimulation of p75 with nerve growth factor causes Ras activation via adapter proteins known from Trk signalling and induces rapid outgrowth of cellular processes. Both inactivation and activation of Ras by p75 are controlled by the phosphorylation state of the receptor’s two intracellular tyrosines. p75 also influences Rho activation and inactivation, and the combined interactions of the receptor with the two GTPases Ras and Rho can regulate neurite formation in an efficient, synergistic way.

Irmgard Dietzel-Meyer

Molekulare Neurobiochem. – Elektrobiologie neuronaler Zellen;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

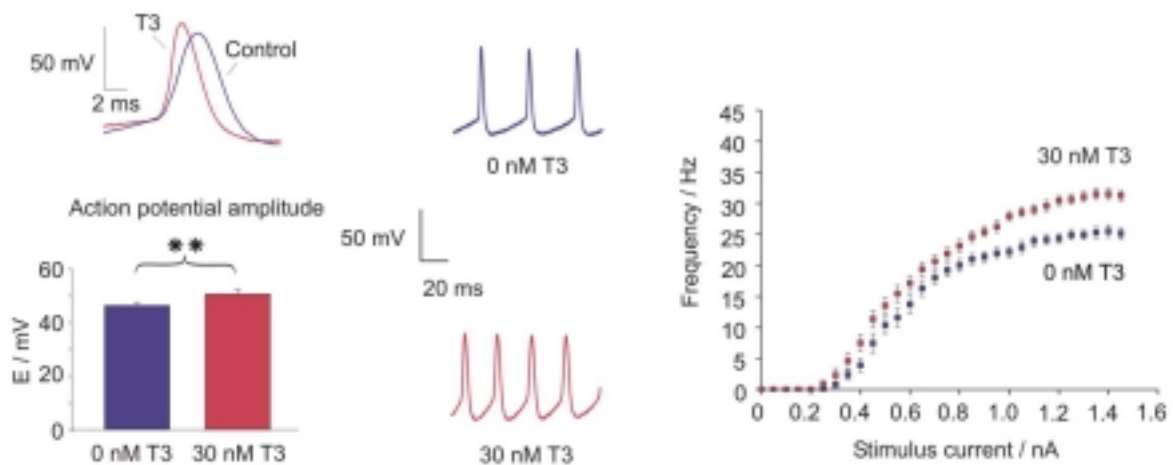
Tel.: ++49-(0)234-3225803 oder: -3224170; FAX: ++49-(0)234-3214105

email: Irmgard.D.Dietzel-Meyer@ruhr-uni-bochum.de

<http://homepage.ruhr-uni-bochum.de/Irmgard.Dietzel-Meyer/>

G. Hoffmann, I.D. Dietzel *Neuroscience* **125** (2004) 369-379. Thyroid hormone regulates excitability in central neurons from postnatal rats.

Wir konnten mit Hilfe von „Patchclamp“- Ableitungen in der Ganzzellkonfiguration zeigen, dass das biologisch aktive Schilddrüsenhormon 3,5,3'-Triiodo-L-thyronin (T3) die Na^+ -Stromdichte im Vergleich zur K^+ -Stromdichte in den Membranen postnataler Nervenzellen aus dem Neocortex und dem Hippocampus neugeborener Ratte hochreguliert. Diese Hochregulation war von größeren Aktionspotenzialamplituden, sowie einer schnelleren Umladung der Membrankapazität begleitet. Dies führte zu höher frequenten Aktionspotenzialsalven im Vergleich zu Kontrollzellen, die ohne T3- Vorbehandlung untersucht worden waren. Die vergrößerten Stromdichten konnten nicht nur in kultivierten Zellen, sondern auch in akut dissoziierten Zellen aus hypo- und hyperthyreoten Ratten nachgewiesen werden. Die beobachtete Regulation der Na^+ -Stromdichte könnte der verlangsamten Nervenleitungsgeschwindigkeit, sowie der charakteristischen Verlangsamungen von Sprache, Bewegung und Wahrnehmung zu Grunde liegen, die bei einer Schilddrüsenunterfunktion während der Hirnentwicklung auftreten.



Using patch-clamp recordings in the whole cell configuration we demonstrated that the biologically active thyroid hormone 3,5,3'-triiodo-L-thyronine (T3) causes an upregulation of the Na^+ -current density with respect to the K^+ current density in membranes of cultured hippocampal and cortical neurons from postnatal rats. This upregulation was accompanied by larger action potential amplitudes, faster charging of the membrane capacitance as well as increased action potential frequencies as compared with those from cells cultured under T3-free conditions. The increased current densities were not only recorded in cultured cells but also in acutely dissociated cells from rats treated with thyroid hormone compared with control rats or rats treated with a drug, blocking thyroid hormone synthesis (6-n-Propyl-2-thiouracil). The regulation of the Na^+ -current density could explain the slowed nerve conduction velocity as well as the characteristic slowing of speech, movements and sensations occurring in postnatal hypothyroidism.

Katrin Sommer

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

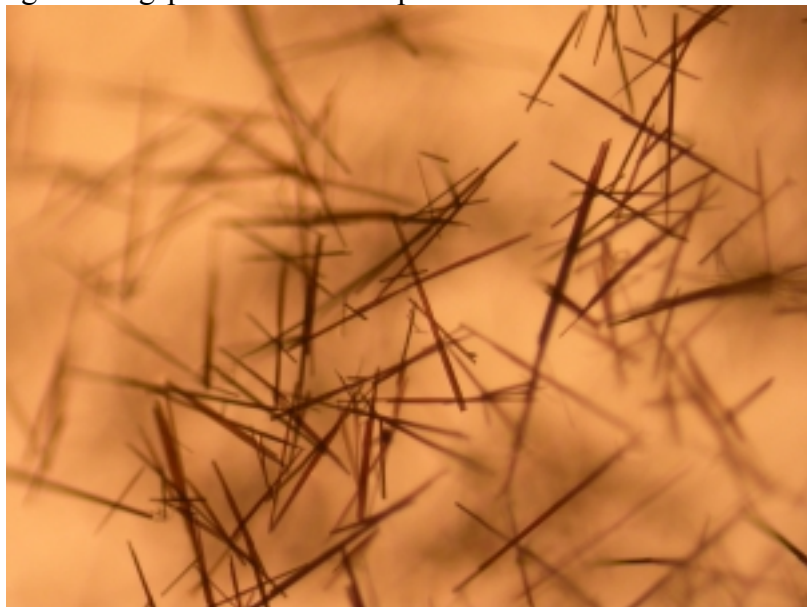
Tel.: ++49-(0)234-3227522; FAX: ++49-(0)234-3214174

email: katrin.sommer@ruhr-uni-bochum.de

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

K. Lehmeyer, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **15** (2004) 79, 36-40. Wie wirkt ein ACE-Saft?

Ziel war es, exemplarisch an Vitamin C einen Modellversuch zur Veranschaulichung der antioxidativen Wirkung zu entwickeln. Ausgehend vom Naturphänomen der enzymatischen Bräunung und deren Verhinderung durch Vitamin C kristallisieren sich drei Faktoren für einen Modellversuch heraus: die phenolische Verbindung, Sauerstoff als Oxidationsmittel und das Antioxidationsmittel Vitamin C. Als phenolisches Modellsubstrat wird Hydrochinon eingesetzt, dessen Oxidationsprodukt gut nachweisbar ist. Der Modellversuch funktioniert aber nicht nur mit Sauerstoff, sondern auch mit anderen Oxidationsmitteln, wie Eisen(III)-Ionen oder Permanganat-Ionen, deren reduzierte Form darüber hinaus gut identifizierbar ist. Beim Einsatz von Ascorbinsäure wird das Hydrochinon vor der Oxidation durch das Oxidationsmittel geschützt, sie selbst wird dabei oxidiert und ist nicht mehr nachweisbar. Hinter dem Begriff Antioxidationsmittel verbirgt sich nichts anderes als ein effizient wirkendes Reduktionsmittel. Somit wird für die Schüler das Basiskonzept der Redoxreaktion mit einem wichtigen Alltagsphänomen verknüpft.



The goal was to develop an exemplary model experiment on the basis of vitamin C to illustrate the antioxidative properties. Starting from the natural phenomenon of the enzymatic browning and its prevention by vitamin C, three factors for a model experiment have emerged: the phenolic compound, oxygen as oxidizing agent and the antioxidizing agent vitamin C. As phenolic model substrate hydroquinone, the oxidation product of which is well verifiable, is employed. The model experiment does not only work with oxygen but also with other oxidizing agents like iron(III) ions or permanganate ions, the reduced form of which is, furthermore, well identifiable. While using ascorbic acid hydroquinone is protected from oxidation by the oxidizing agent, the acid itself is oxidized in the process and is no longer detectable. The term antioxidizing agent does describe nothing else but an efficient reducing agent. Thus for the pupils the basic concept of the redox reaction is interrelated to an important everyday phenomenon.

Veröffentlichungen

Anorganische Chemie 2	40
Organische Chemie 1	41
Organische Chemie 2	41
Physikalische Chemie 1	42
Physikalische Chemie 2	44
Analytische Chemie	45
Theoretische Chemie	47
Technische Chemie	48
Biochemie 1	51
Biochemie 2	51
Didaktik der Chemie	52
Graduate School of Chemistry and Biochemistry (GSCB)	54
Dissertationen an der Fakultät für Chemie 2004	55

Anorganische Chemie 2

- C. Gemel, T. Steinke, M. Cokoja, A. Kempter, R. A. Fischer, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2004) 4161-4171. Transition metal chemistry of low valent group 13 organyls.
- R. A. Fischer, D. Weiss, M. Winter, I. M. Müller, H. D. Kaesz, N. Froehlich, G. Frenking, *J. Organomet. Chem.* **689** (2004) 4611-4623. The reaction of the group-13 alkyls ER_3 ($E=Al, Ga, In$; $R=CH_2^tBu, CH_2SiMe_3$) with the platinum-complex $[(dcpe)Pt(H)(CH_2^tBu)]$.
- J. Khanderi, D. Rische, H. W. Becker, R. A. Fischer, *J. Mat. Chem.* **14** (2004) 3210-3214. Ligand stabilised dialkyl aluminium amides as new precursors for aluminium nitride thin films.
- M. K. Schröter, L. Khodeir, J. Hambrock, E. Loeffler, M. Muhler, R. A. Fischer, *Langmuir* **20** (2004) 9453-9455. Redox Chemistry of Cu Colloids Probed by Adsorbed CO: An in Situ Attenuated Total Reflection Fourier Transform Infrared Study.
- L. Lu, R. A. Fischer, *Chem. Lett.* **33** (2004) 1318-1319. ZnO particles encapsulated in porous Cu_2O nanoparticle layer prepared by UV light-induced photoreduction of $Cu(NO_3)_2 \cdot 3H_2O$ over ZnO in methanol suspension.
- A. Niklewski, W. Azzam, T. Strunskus, R. A. Fischer, C. Woell, *Langmuir* **20** (2004) 8620-8624. Fabrication of Self-Assembled Monolayers Exhibiting a Thiol-Terminated Surface.
- A. Baunemann, R. Thomas, R. Becker, M. Winter, R. A. Fischer, P. Ehrhart, R. Waser, A. Devi, *Chem. Commun.* (2004) 1610-1611. Mononuclear precursor for MOCVD of HfO_2 thin films.
- R. Becker, L. Lu, H. Parala, F. Hipler, A. Birkner, Ch. Wöll, O. Hinrichsen, O.P. Tkachenko, K.V. Klementiev, W. Grünert, S. Schäfer, H. Wilmer, M. Muhler, R.A. Fischer, *Angew. Chem.* **116** (2004) 2899-2903. MOCVD-Beladung mesoporöser Silicatmatrizen mit Cu/ZnO: neuartige Trägerkatalysatoren für die Methanolsynthese. *Angew. Chem., Int. Ed.* **43** (2004) 2839-2842. MOCVD-loading of mesoporous siliceous matrices with Cu/ZnO: Supported catalysts for methanol synthesis.
- T. Steinke, C. Gemel, M. Cokoja, M. Winter, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **43** (2004) 2299-2302. $AlCp^*$ as a directing ligand: C-H and Si-H bond activation at the reactive intermediate $[Ni(AlCp^*)_3]$.
- U. Weckenmann, S. Mittler, S. Kraemer, A. K. Aliganga, R. A. Fischer, *Chem. Mater.* **16** (2004) 621-628. A Study on the Selective Organometallic Vapor Deposition of Palladium onto Self-assembled Monolayers of 4,4'-Biphenyldithiol, 4-Biphenylthiol, and 11-Mercaptoundecanol on Polycrystalline Silver.
- M. Kurtz, N. Bauer, C. Büscher, H. Wilmer, O. Hinrichsen, R. Becker, S. Rabe, K. Merz, M. Driess, R. A. Fischer, M. Muhler, *Cat. Lett.* **92** (2004) 49-52. New Synthetic Routes to More Active Cu/ZnO Catalysts Used for Methanol Synthesis.
- A. Baunemann, R. Becker, M. Winter, R.A. Fischer, R. Thomas, P. Ehrhart, R. Waser, A. Devi, *Chem. Commun.* **14** (2004) 1610-1611. Mononuclear precursor for MOCVD of HfO_2 thin films.
- R. Bhakta, R. Thomas, F. Hipler, H. Bettinger, J. Müller, P. Ehrhart, and A. Devi, *J. Mater. Chem.* **14** (2004) 3231-3238. Precursor engineering and evaluation: Studies on the nature of molecular mechanisms involved in the MOCVD of TiO_2 thin films.
- R. Thomas, S. Regnery, P. Ehrhart, R. Waser, R. Bhakta, U. Patil, and A. Devi, *Ferroelectrics*, **63** (2004). High-k dielectric materials by metalorganic chemical vapor deposition: Growth and characterization.

- R. Schmid, *J. Comput. Chem.* **25** (2004) 799-812. "Car-Parrinello Molecular-Dynamics Simulations with Real Space Methods"
- T. Cadenbach, C. Gemel, R. Schmid, S. Block, R. A. Fischer, *Dalton Transactions* **20** (2004) 3171-3172. „The reaction of $\text{RhCp}^*(\text{CH}_3)_2(\text{L})$ (L = pyridine, dmsO) with GaCp^* and AlCp^* : A new type of carbon-carbon bond activation reaction.“

Organische Chemie 1

- S. A. Ivanov, E. M. Volkov, T. S. Oretskaya, S. Müller, *Tetrahedron* **60** (2004) 9273-9281. Chemical synthesis of an artificially branched hairpin ribozyme variant with RNA cleavage activity.
- H. D. Arndt, R. Welz, S. Müller, B. Ziemer, U. Koert, *Chem. Eur. J.* **10** (2004) 3945-3962. Stereoselective synthesis of *trans-threo-trans* oligo-pyrrolidines: potential agents for RNA cleavage.
- S. A. Ivanov, R. Welz, M. A. Gothik, S. Müller, *Mol. Biol.* **38** (2004) 798-803. RNA synthesis by T7 RNA polymerase supported primer extension.
- S. Müller, J. Wolf, S. A. Ivanov, *Curr. Org. Synth.* **1** (2004) 293-307. Current strategies for the synthesis of RNA.
- S. Müller, *Bioforum* **6** (2004) 52-53. RNA-Reparatur durch maßgeschneiderte Ribozyme.
- S. Müller, S., in *Highlights in Bioorganic Chemistry* (C. Schmuck, H. Wennemers, eds.), 2004, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, pp 419-421. Ribozymes.
- S. Müller, R. Welz, S. A. Ivanov, K. Bossmann, in *Highlights in Bioorganic Chemistry* (C. Schmuck, H. Wennemers, eds.) (2004) Wiley-VCH, Weinheim, Germany, pp 404-419. Twin Ribozymes.

Organische Chemie 2

- C. Kolano, G. Bucher, H. H. Wenk, M. Jäger, O. Schade, W. Sander, *J. Phys. Org. Chem.* **17** (2004) 207-214. Photochemistry of 9-Fluorenoneoxime phenylglyoxylate: A Combined TRIR, TREPR, and ab initio Study.
- C. Lu, G. Bucher, W. Sander, *ChemPhysChem* **5** (2004) 47-56. Photoinduced Interactions Between Oxidized and Reduced Lipoic Acid and Riboflavin (Vitamin B2).
- C. Lu, G. Bucher, W. Sander, *ChemPhysChem* **5** (2004) 399-402. Steady-State and Time-Resolved Studies on Disulfide-Bond Cleavage Using Aniline as Electron-Donor Photosensitizer.
- M. Winkler, B. Cakir, W. Sander, *J. Am. Chem. Soc.* **126** (2004) 6135-6149. 3,5-Pyridyne – A Heterocyclic meta-Benzyne Derivative.
- M. Gunia, P. Jakob, W. Sander, C. Wöll, *J. Phys. Chem. B* **108** (2004) 1402-14031. Photoinduced Reactions of a Carbene Precursor on a Metal Surface: Diphenyldiazomethane on Clean and CO-covered Ru(0001).
- T. Sato, A. Narazaki, Y. Kawaguchi, H. Niino, G. Bucher, D. Grote, J. J. Wolff, H. H. Wenk, W. Sander, *J. Am. Chem. Soc.* **126** (2004) 7846-7852. The Generation and Photoreactions of 2,4,6-Trinitreno-1,3,5-triazine, a Septet Trinitrene.
- C. Kolano, K. Gomann, W. Sander, *Eur. J. Org. Chem.* (2004) 4167-4176. An Efficient Peptide Synthesis Suitable for Large Scale Synthesis of Small Cyclic Peptides and Peptide Fragments.

- L. George, W. Sander, *Spectrochim. Acta* (2004) 3225-3232. Matrix isolation infrared and ab initio study of the hydrogen bonding between formic acid and water.
- E. Sánchez-García, L. George, L. A. Montero, W. Sander, *J. Phys. Chem. A* **108** (2004) 11846-11854. 1:2 Formic Acid –Acetylene Complexes: Ab Initio and Matrix Isolation Studies of Weakly Interacting Systems.
- C. Tönshoff, G. Bucher, *Eur. J. Org. Chem.* (2004) 269-271. Evidence for intramolecular ylide formation in the decay of a singlet aryl nitrene.
- H. F. Bettinger, *Org. Lett.* **6** (2004) 731-734. Effects of finite carbon nanotube length on the sidewall addition of fluorine atom and methylene.
- H. F. Bettinger, K. N. Kudin, G. E. Scuseria, *J. Phys. Chem. A* **108** (2004) 3016-3018. Structural models of fluorine-graphite intercalation compounds from density functional theory.
- H. F. Bettinger, R. I. Kaiser, *J. Phys. Chem. A* **108** (2004), 4576-4586. The Reaction of Benzene and Boron Atom: Mechanism of Formation of Benzoborirene and Hydrogen Atom.
- R. Bhakta, R. Thomas, F. Hipler, H. F. Bettinger, J. Müller, P. Ehrhart, A. Devi, *J. Mater. Chem.* **14** (2004) 3231-3238. MOCVD of TiO₂ thin films and studies on the nature of molecular mechanisms involved in the decomposition of [Ti(OPrⁱ)₂(tbaoc)₂].
- G. Dyker, O. Muth, *Eur. J. Org. Chem.* **2004** 4319-4322. Synthesis of Methylene- and Methine-Bridged Oligopyridines.

Physikalische Chemie 1

- S. Lukas, S. Söhnchen, G. Witte and Ch. Wöll, *Chem. Phys. Chem.* **5** (2004) 266-270. Epitaxial growth of Pentacene films on metal surfaces.
- R. Becker, L. Lu, H. Parala, F. Hipler, A. Birkner, Ch. Wöll, O. Hinrichsen, O.P. Tkachenko, K.V. Klementiev, W. Grünert, S. Schäfer, H. Wilmer, M. Muhler, R.A. Fischer, *Angew. Chem.* **116** (2004) 2899-2903. MOCVD-Beladung mesoporöser Silicatmatrizen mit Cu/ZnO: neuartige Trägerkatalysatoren für die Methanolsynthese. *Angew. Chem., Int. Ed.* **43** (2004) 2839-2842. MOCVD-loading of mesoporous siliceous matrices with Cu/ZnO: Supported catalysts for methanol synthesis.
- T. Strunskus, O. Fuchs, L. Weinhardt, C. Heske, M. Guraya, M. Muhler, V. Staemmler, Ch. Wöll, *J. Electr. Spectrosc. Rel. Phenom.* **134** (2004) 183-189. The valence electronic structure of zinc oxide powders as determined by X-ray emission spectroscopy: Variation of electronic structure with particle size.
- R.G. Endres, C.Y. Fong, L.H. Yang, G. Witte, Ch. Wöll, *Computational Materials Science*, **29** (2004) 362-370. Structural and electronic properties of pentacene molecule and molecular pentacene solid.
- M. Gunia, P. Jakob, W. Sander, Ch. Wöll, *J. Phys. Chem. B* **108** (37) (2004) 14025-14031. Photoinduced reactions of a carbene precursor on a metal surface: Diphenyldiazomethane on clean and CO-covered Ru(0001).
- P. Cyganik, M. Buck, W. Azzam, Ch. Wöll, *J. Phys. Chem. B* **108** (2004) 4989-4996. Self-Assembled Monolayers of ω -Biphenyl-Alkane-Thiols on Au(111): Influence of Spacer Chain on Molecular Packing.
- Chr. Grunwald, W. Eck, N. Opitz, J. Kuhlmann, Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6** (2004) 4358-4362. Fabrication of 2D-Protein Arrays Using Biotinylated Thiols: results from fluorescence microscopy and atomic force microscopy.

- K. Hänel, S. Söhnchen, S. Lukas, G. Beernink, A. Birkner, T. Strunskus, G. Witte, Ch. Wöll, *J. Mat. Research* **19** 7 (2004) 2049-2056. Organic molecular-beam deposition of perylene on Cu(110): Results from near-edge x-ray absorption spectroscopy, x-ray photoelectron spectroscopy, and atomic force microscopy.
- G. Witte, Ch. Wöll, *J. Mater. Res.* **19** 7 (2004) 1889-1916. Growth of aromatic molecules on solid substrates for applications in organic electronics.
- Ch. Wöll, *J. Phys.: Condens. Matter* **16** (2004) 2981-2994. Hydrogen adsorption on metal oxide surfaces: A reinvestigation using He atom scattering.
- A. Niklewski, W. Azzam, T. Strunskus, R.A. Fischer, Ch. Wöll, *Langmuir* **20** (20) (2004) 8620-8624. Fabrication of self-assembled monolayers exhibiting a thiol-terminated surface.
- G. Beernink, T. Strunskus, G. Witte, Ch. Wöll, *Appl. Phys. Lett.* **85** 3 (2004) 398-400. Importance of dewetting in organic molecular beam deposition: pentacene on gold.
- M. Kunat, U. Burghaus, Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6** (2004) 4203-4207. The adsorption of hydrogen on the rutile TiO₂(110) surface.
- S. Gil Girol, Th. Strunskus, M. Muhler, Ch. Wöll, *J. Phys. Chem. B* **108** (36) (2004) 13736-13745. The reactivity of ZnO-surfaces towards maleic anhydride.
- B. Meyer, D. Marx, O. Dulub, U. Diebold, M. Kunat, D. Langenberg, Ch. Wöll, *Angewandte Chemie* **116** (2004) 6810-6814. Partielle Dissoziation von Wasser führt zu stabilen Überstrukturen auf der Oberfläche von Zinkoxid. *Angewandte Chemie, Int. Ed.* **43** (2004) 6642-6645. Partial dissociation of water leads to stable superstructures on the surface of zinc oxide.
- S. Stepanow, T. Strunskus, M. Lingenfelder, A. Dimitriev, H. Spillmann, N. Lin, J.V. Barth, Ch. Wöll, K. Kern, *J. Phys. Chem. B* **108** (50) (2004) 19392-19397. Deprotonation-driven phase transformations in terephthalic acid self-assembly on Cu(100).
- S. Söhnchen, S. Lukas, G. Witte, *J. Chem. Phys.* **121** (2004) 525. Epitaxial growth of Pentacene films on Cu(110).
- G. Witte, *J. Phys: Condens. Matter* **16** (2004) S2937. Probing metallization transitions by metastable He-atom scattering.
- H. Waldmann, I.-M. Karaguni, M. Carpintero, E. Gourzoulidou, C. Herrmann, C. Brockmann, H. Oschkinat, O. Müller, *Angew. Chem. Int. Ed.* **43** (2004) 454-458. Sulindac-derived Ras pathway inhibitors target the Ras-Raf interaction and downstream effectors in the Ras pathway.
- O. Müller, E. Gourzoulidou, M. Carpintero, I.-M. Karaguni, A. Langerak, C. Herrmann, T. Möroý, H. Waldmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **43** (2004) 450-454. Identification of potent Ras signaling inhibitors by pathway-selective phenotype-based screening.
- C. Kiel, T. Selzer, Y. Shaul, G. Schreiber, C. Herrmann, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **101** (2004) 9223-9228. Electrostatically optimized Ras-binding Ral guanine dissociation stimulator mutants increase the rate of association by stabilizing the encounter complex.
- C. Kiel, L. Serrano, C. Herrmann, *J. Mol. Biol.* **340** (2004) 1039-1058. A detailed thermodynamic analysis of ras/effector complex interfaces.
- A. Ghosh, R. C. Uthaiiah, J. C. Howard, C. Herrmann, E. Wolf, *Mol. Cell* **15** (2004) 727-739. Crystal Structure of IIGP1: A Paradigm for Interferon-Inducible p47 Resistance GTPases.
- G. J. K. Praefcke, S. Kloep, U. Benscheid, H. Lilie, B. Prakash, C. Herrmann, *J. Mol. Biol.* **344** (2004) 257-269. Identification of residues in the human guanylate-binding protein 1 critical for nucleotide binding and cooperative GTP hydrolysis.

- Th. Martin and F. Stuhl, *J. Phys. Chem. A* **108** (2004) 1741-1745. Energy transfer from $\text{NH}(\text{a}^1\Delta, \text{v})$ to $\text{O}_2(\text{X}^3\Sigma_g^-)$: Kinetics of Single Vibrational States.

Physikalische Chemie 2

- F. Madeja, M. Havenith, K. Nauta, R.E. Miller, J. Chocholoušová, P. Hobza, *J. Chem. Phys.* **120** (2004) 10554. A polar isomer of formic acid dimer formed in helium nano-droplets. Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology.
- R. A. Jockusch, R. T. Kroemer, F. O. Talbot, L. C. Snoek, P. Çarçabal, J. P. Simons, M. Havenith, J. M. Bakker, I. Compagnon, G. Meijer, G. von Helden, *J. Am. Chem. Soc.* **126** (2004) 5709. Probing the glycosidic linkage: UV and IR ion-dip spectroscopy of lactoside.
- S. Hoffmann, M. Hofmann, E. Bründermann, M. Havenith, M. Matus, J. V. Moloney, A. S. Moskalenko, M. Kira, S. W. Koch, S. Saito, K. Sakai, *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004) 3585. Four-wave mixing and direct terahertz emission with two-color semiconductor lasers.
- E. Bründermann, A. Bergner, F. Petrat, R. Schiwon, G. Wollny, I. Kopf, H. de Groot, M. Havenith, *Analyst* **129** (2004) 893. Fast quantification of water in single living cells by near-infrared microscopy.
- W. Schröer, H. Weingärtner, *Pure Appl. Chem.* **76** (2004) 19-27. Structure and criticality of ionic fluids.
- W. Schröer, H. Weingärtner, *Novel Approaches to the Structure and Dynamics of Liquids* (Herausg. J. Samios and V. A. Durov) Kluwer Academic Publishers 2004 503-537.
- H. Weingärtner, H. Nadolny, A. Oleinikova, R. Ludwig, *J. Chem. Phys.* **120** (2004) 11692-11697. Collective contributions to the dielectric relaxation of hydrogen-bonded liquids
- A. Oleinikova, P. Sasisanker, H. Weingärtner *J. Phys. Chem.* **108** (2004) 8467-8474. What can really be learnt from dielectric spectroscopy of protein solutions. A case study of ribonuclease A.
- P. Sasisanker, A. Oleinikova, H. Weingärtner, R. Ravindra, R. Winter *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6** (2004) 1899-1905. Solvation properties and stability of ribonuclease A in normal and deuterated water by dielectric relaxation and differential scanning/ pressure perturbation calorimetry.
- D. Marx, H. Weingärtner *CHemie, Schweizer Fachzeitschrift der Chemieberufe* **13** (2004) 2-9. Wasser - Mehr als ein Lösungsmittel.
- D. Tuma, B. Wagner, G.M. Schneider, in: *Supercritical Fluids as Solvents and Reaction Media* (G. Brunner, ed.), Elsevier 2004 121 – 146. High-pressure solubility measurement of solids in near- and supercritical fluids.
- Th. Kraska, K.O. Leonhard, J. Jurtzik, D. Tuma, G.M. Schneider, in: *Supercritical Fluids as Solvents and Reaction Media* (G. Brunner, ed.), Elsevier 2004 241 – 268. Correlation of the solubility of low-volatile organic compounds in near- and supercritical fluids based on an accurate equation of state.
- G.M. Schneider, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6** (2004) 2285-2290. The continuity and family concepts – Useful tools in Fluid Phase Science

Analytische Chemie

- W. S. Sheldrick, *Cages and Clusters of the Chalcogens* in M. Driess, H. Nöth (eds.) *Molecular Clusters of the Main Group Elements*, S. 230 – 245. Wiley-VCH, Weinheim, 2004, ISBN 3-527-30654-4.
- M. Heller, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **630** (2004) 1191 - 1195. Bimetallic copper(I)-mercury(II) and copper(I)-potassium(I) coordination polymers with bridging di- and trithiacrown ethers.
- W. S. Sheldrick, *Structural Analysis* in R. Kellner et al.(ed.) *Analytical Chemistry, A Modern Approach to Analytical Science*, Second Edition, S. 952 – 972. Wiley-VCH, Weinheim, 2004, ISBN 3-527-30590-4.
- M. Ali, A. Ray, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, S. Gao, A. I. Sahmes, *New J. Chem.* **28** (2004) 412-417. Synthesis, crystal structure, EPR and magnetic properties of a cyano-bridged Cu^{II}-Ni^{II} heterobimetallic complex: an unusual structure with long-range ferromagnetic exchange through hydrogen bonding.
- M. Mijanuddin, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, M. Ali, N. Chattopadhyay, *J. Mol. Struct.* **693** (2004) 161-165. Crystal structure and feasibility of intramolecular proton transfer reactions of salicylaldazine.
- T. Kolev, R. Wortmann, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, M. Heller, *Acta Cryst E60* (2004) o956-o957. 4-Phenylpyridinium Hydrogensquarate.
- N. Anad, S. Koul, S. C. Taneja, G. N. Qazi, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, T. van Almsick, *Acta Cryst E60* (2004) o1215 – o1216. (3R, 4S)-cis-3-acetoxy-1-(4-methoxyphenyl)-4-(2-furanyl)azetidin-2-one.
- M. Heller, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **630** (2004) 1869-1874. Copper(I) coordination polymers with alkanedithiol and –dinitrile bridging ligands.
- S. Manka, F. Becker, O. Hohage, W. S. Sheldrick, *J. Inorg. Biochem.* **98** (2004) 1947-1956. Cisplatin-mediated selective hydrolytic cleavage of methionine-containing peptides with neighbouring serine or histidine residues.
- T. Kolev, R. Wortmann, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, M. Heller, *Acta Cryst E60* (2004) o1386-o1387. 4-Hydroxy-3,5-dimethoxybenzaldehyde (syringaldehyde).
- T. Kolev, R. Wortmann, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Acta Cryst E60* (2004) o1449-o1450. 4-Methoxypyridinium betaine of squaric acid.
- F. Turcu, A. Schulte, W. Schuhmann, *ABC – Analytical and Bioanalytical Chemistry* **380** (2004) 736-741. Scanning electrochemical microscopy (SECM) in nanoliter droplets using an integrated working/reference electrode assembly.
- S. Isik, M. Etienne, J. Oni, A. Blöchl, S. Reiter, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **76** (2004) 6389-6394. Dual microelectrodes for distance control and detection of nitric oxide from endothelial cells by means of scanning electrochemical microscope.
- F. Turcu, A. Schulte, G. Hartwich, W. Schuhmann, *Biosensors & Bioelectronics* **20** (2004) 925-932. Imaging immobilised ssDNA and detecting DNA hybridisation by means of the repelling mode of scanning electrochemical microscopy (SECM)
- S. Isik, J. Oni, V. Rjabova, S. Neugebauer, W. Schuhmann, *Microchim. Acta* **148** (2004) 59-64. Entrapment of metalloporphyrins within an electrodeposition paint layer as a basis for developing of a nitric oxide sensor

- B. Ngounou, S. Neugebauer, A. Frodl, S. Reiter, W. Schuhmann *Electrochim. Acta* **49** (2004) 3855-3863. Combinatorial synthesis of a library of acrylic acid-based polymers and their evaluation as immobilisation matrix for amperometric biosensors.
- L. Pitta Bauermann, W. Schuhmann, A. Schulte, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **6** (2004) 4003-4008. An advanced biological scanning electrochemical microscope (Bio-SECM) for studying individual living cells
- A. Schulte, S. Belger, W. Schuhmann *Materials Science & Engineering A* **378** (2004) 523-526. Imaging localized corrosion of NiTi shape-memory alloys by means of alternating current scanning electrochemical microscopy (AC-SECM)
- M. Etienne, A. Schulte, S. Mann, G. Jordan, I.D. Dietzel, W. Schuhmann *Anal. Chem.* **76** (2004) 3682-3688. Constant-distance mode scanning potentiometry. I. Visualization of Calcium carbonate dissolution in aqueous solution.
- F. Turcu, A. Schulte, G. Hartwich, W. Schuhmann, *Angew. Chem.* **116** (2004) 3564-3567. Markerfreie elektrochemische Detektion von DNA-Hybridisierung durch Modulation des Feedbackstroms in der elektrochemischen Rastermikroskopie. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **43** (2004) 3482-3485. Label-free electrochemical recognition of DNA hybridization by means of modulation of the feedback current in SECM
- Lau, S. Reiter, W. Schuhmann, P. Gründler *ABC – Analytical and Bioanalytical Chemistry* **379** (2004) 255-260. Amperometric biosensors with heated electrodes operating in non-isothermal mode for interference elimination
- S. Belger, A. Schulte, C. Hessing, M. Pohl, W. Schuhmann. *Materialwissenschaften und Werkstofftechnik* **35** (2004) 276-279. Alternating current scanning electrochemical microscopy (AC-SECM) studies on the surface of electrochemically polished NiTi shape memory alloys
- J. Oni, A. Pailleret, S. Isik, N. Diab, I. Radtke, A. Blöchl, M. Jackson, F. Bedioui, W. Schuhmann, *ABC – Analytical and Bioanalytical Chemistry* **378** (2004) 1594-1600. An array of functionalised electrodes for the detection of nitric oxide released by endothelial cells using different NO-sensing chemistries.
- M. Niculescu, S. Gáspár, A. Schulte, E. Csöregi, W. Schuhmann, *Biosensors & Bioelectronics* **19** (2004) 1175-1184. Visualization of micropatterned complex biosensor sensing chemistries by means of scanning electrochemical microscopy.
- M. Etienne, A. Schulte, W. Schuhmann *Electrochem. Commun.* **6** (2004) 288-293. High Resolution Constant-Distance Mode Alternating Current Scanning Electrochemical Microscopy (AC-SECM).
- S. Reiter, D. Ruhlig, B. Ngounou, S. Neugebauer, S. Janiak, A. Vilkanauskyte, T. Erichsen, W. Schuhmann, *Macromol. Rapid Commun.* **25** (2004) 348-354. An electrochemical robotic system for the optimization of amperometric glucose biosensors based on a library of cathodic electrodeposition paints.
- S. Neugebauer, S.R. Evans, Z.P. Aguilar, M. Mosbach, I. Fritsch, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **76** (2004) 458-463. Analysis in ultrasmall volumes: Microdispensing of picoliter droplets and analysis without protection from evaporation.
- B. Ballesteros Katemann, A. Schulte, W. Schuhmann. *Electroanalysis* **16** (2004) 60-65. Constant-Distance Mode Scanning Electrochemical Microscopy Part II: High-resolution SECM imaging employing Pt nanoelectrodes as miniaturised scanning probes.
- Th. Blenkins, P. Zinn, *CCA* **77** (2004) 213-219. Applying Genetic Algorithms in Structure Elucidation of Halogenated Alkanes Considering Corresponding ¹³C NMR Spectra.

- I. M. Müller, S. Spillmann, H. Franck, R. Pietschnig, *Chemistry, A European Journal* **10** (2004) 2207-2213. Rational Design of the First Closed Coordination Capsule with Octahedral Outer Shape.
- R. A. Fischer, D. Weiss, M. Winter, I. M. Müller, H. D. Kaesz, N. Fröhlich, G. Frenking, *J. Organometal. Chem.* **689** (2004) 4611-4623. The reaction of the group-13 alkyls ER_3 ($E=Al, Ga, In$; $R=CH_2t-Bu, CH_2SiMe_3$) with the platinum-complex $[(dcpe)Pt(H)(CH_2t-Bu)]$.
- M. Nowaczyk, C. Berghaus, R. Stoll, M. Rögner, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6** (2004), 4878-4881. Preliminary structural characterisation of the 33 kDa protein (PsbO) in solution studied by site-directed mutagenesis and NMR spectroscopy.

Theoretische Chemie

- B. Meyer, D. Marx, O. Dulub, U. Diebold, M. Kunat, D. Langenberg, Ch. Wöll, *Angew. Chem. Int. Ed.* **43** (2004) 6641-6645. Partial Dissociation of Water Leads to Stable Superstructures on the Surface of Zinc Oxide. *Angew. Chem.* **116** (2004) 6809-6814. Partielle Dissoziation von Wasser führt zu stabilen Überstrukturen auf der Oberfläche von Zinkoxid.
- M. Konopka, R. Rousseau, I. Stich, D. Marx, *J. Am. Chem. Soc.* **126** (2004) 12103-12111. Detaching Thiolates from Copper and Gold Clusters: Which Bonds to Break?
- R. Ramirez, T. Lopez--Ciudad, P. Kumar P, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **121** (2004) 3973-3983. Quantum corrections to classical time-correlation functions: Hydrogen bonding and anharmonic floppy modes.
- R. Rousseau, V. Kleinschmidt, U.W. Schmitt, D. Marx, *Angew. Chem. Int. Ed.* **43** (2004) 4804-4807. Assigning Protonation Patterns in Water Networks in Bacteriorhodopsin Based on Computed IR Spectra. *Angew. Chem.* **116** (2004) 4908-4911. Zuordnung der Protonierungsmuster von Wassernetzwerken in Bakteriorhodopsin.
- B. Meyer, D. Marx, *Phys. Rev. B* **69** (2004) 235420-1-235420-7. Density-functional study of Cu atoms, monolayers, films, and coadsorbates on polar ZnO. **92** (2004), 183401-1-183401-4. Quantum and Thermal Fluctuation Effects on Photoabsorption Spectra of Clusters.
- E. Schreiner, C. Nicolini, B. Ludolph, R. Ravindra, N. Otte, A. Kohlmeyer, R. Rousseau, R. Winter, D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 148101-1 - 148101-4. Folding and Unfolding of an Elastinlike Oligopeptide: "Inverse Temperature Transition," Reentrance, and Hydrogen--Bond Dynamics.
- R. Rousseau, V. Kleinschmidt, U.W. Schmitt, D. Marx, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6** (2004) 1848-1859. Modeling protonated water networks in bacteriorhodopsin.
- R. Rousseau, E. Schreiner, A. Kohlmeyer, D. Marx, *Biophys. J.* **86** (2004) 1393-1407. Temperature-Dependent Conformational Transitions and Hydrogen-Bond Dynamics of the Elastin-Like Octapeptide GVG(VPGVG): a Molecular-Dynamics Study.
- D. Marx, *Physik Journal* **3(5)** (2004) 33-39. Wasser, Eis und Protonen: Mit Quantensimulationen zum molekularen Verständnis von Wasserstoffbrücken, Protonentransfer und Phasenübergängen.
- D. Marx, Proceedings of the "Idea-Finding Symposium: Frankfurt Institute for Advanced Studies", 139-153. Editors: W. Greiner and J. Reinhardt (EP Systema Bt., Debrecen, 2004), Theoretical Chemistry in the 21st Century: The "Virtual Lab".
- D. Marx, *Science* **303** (2004) 634-636. Throwing Tetrahedral Dice.
- N. L. Doltsinis, *Faraday Disc.* **127** (2004) 231-233. Ab initio surface hopping study of internal conversion of uridine.

- J. R. Asher, N. L. Doltsinis, and M. Kaupp, *J. Am. Chem. Soc.* **126** (2004) 9854-9861. Ab initio molecular dynamics simulations and g-tensor calculations of aqueous benzosemiquinone: effects of regular and "T-stacked" hydrogen bonds.
- F. Lechermann, M. Fähnle, B. Meyer, and C. Elsässer, *Phys. Rev. B* **69** (2004) 165116-1 - 65116-7. Electronic correlations, magnetism, and structure of Fe-Al subsystems: An LDA US-study.
- H. Langer and N. L. Doltsinis, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6** (2004) 2742-2748. Nonradiative decay of photoexcited methylated guanine.
- N. L. Doltsinis, *Mol. Phys.* **102** (2004) 499-506. Excited state proton transfer and internal conversion in o-hydroxybenzaldehyde: new insights from nonadiabatic ab initio molecular dynamics.
- B. Meyer, *Phys. Rev. B* **69** (2004) 045416-1 - 045416-10. First-principles study of the polar O-terminated ZnO surface in thermodynamic equilibrium with oxygen and hydrogen.
- S. Borowski, T. Klüner, H.-J. Freund, I. Klinkmann, K. Al-Shamery, M. Pykavy, V. Staemmler. *Appl. Phys. A* **78** (2004) 223. Lateral Velocity Distributions in Laser Induced Desorption of CO from Cr₂O₃(0001): Experiment and Theory
- T. Strunskus, O. Fuchs, L. Weinhardt, C. Heske, M. Guraya, M. Muhler, V. Staemmler, Ch. Wöll. *J. Electr. Spectrosc. Relat. Phenom.* **134** (2004) 183. The Valence Electronic Structure of Zinc Oxide Powders as Determined by X-ray Emission Spectroscopy: Variation of Electronic Structure with Particle Size
- G. Pacchioni, C. Di Valentin, D. Dominguez-Ariza, F. Illas, T. Bredow, T. Klüner, V. Staemmler. *J. Phys.: Condens. Matter* **16** (2004) S2497. Bonding of NH₃, CO, and NO to NiO and Ni-doped MgO: A Problem for Density Functional Theory
- W. Kutzelnigg, D. Mukherjee *J. Chem.Phys.* **120** (2004) 7340-7349. Irreducible Brillouin conditions and contracted Schrödinger equations for *n*-electron systems. III. Systems of noninteracting electrons.
- W. Kutzelnigg, D. Mukherjee *J. Chem.Phys.* **120** (2004) 7350-7368. Irreducible Brillouin conditions and contracted Schrödinger equations for *n*-electron systems. IV. Perturbative analysis
- W. Kutzelnigg. in "Theory of NMR and EPR parameters", (M. Kaupp, V. Malkin, and M. Bühl ed.) Wiley-VCh, Berlin, 2004, ISBN 3-527-30779-6, pp 43-82. Fundamentals of Non-relativistic and Relativistic Theory of Relativistic Effects of NMR and EPR parameters
- D. Mukherjee, W. Kutzelnigg, *Chem. Phys. Lett.* **397** (2004) 174. Some comments on the coupled cluster with generalized singles and doubles (CCGSD) ansatz.

Technische Chemie

- M. Kurtz, N. Bauer, H. Wilmer, O. Hinrichsen, M. Muhler. *Chem. Ing. Tech.* **76** (2004) 42-46. Rationales Katalysatordesign am Beispiel des Methanolkatalysators.
- M. Kurtz, N. Bauer, C. Büscher, H. Wilmer, O. Hinrichsen, R. Becker, S. Rabe, K. Merz, M. Driess, R.A. Fischer, M. Muhler. *Catal. Lett.* **92** Nos. 1-2 (2004) 49-52. New synthetic routes to more active Cu/ZnO catalysts used for methanol synthesis.
- T. Strunskus, O. Fuchs, L. Weinhardt, C. Heske, M. Guraya, M. Muhler, V. Staemmler, Ch. Wöll. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **134** (2004) 183-189. The valence electronic structure of zinc oxide powders as determined by X-ray emission spectroscopy : variation of electronic structure with particle size.

- M.-D. Appay, J.-M. Manoli, C. Potvin, M. Muhler, U. Wild, O. Pozdnyakova, Z. Paal. *J. Catal.* **222** (2004) 419-428. High-resolution electron microscopic, spectroscopic, and catalytic studies of intentionally sulfided Pt/ZrO₂-SO₄ catalysts.
- X.M. Zhu, M. Schön, U. Bartmann, A.C. van Veen, M. Muhler. *Appl. Catal. A: General* **266** (2004) 99-108. The dehydrogenation of ethylbenzene to styrene over a potassium-promoted iron oxide-based catalyst: a transient kinetic study.
- S.N. Koc, G. Gürdag, S. Geißler, M. Muhler. *Ind. Eng. Chem. Res.* **43** (2004) 2376-2381. Effect of Nickel, Lanthanum, and Yttrium Addition to Magnesium Molybdate Catalyst on the Catalytic Activity for Oxidative Dehydrogenation of Propane.
- S.N. Koc, G. Gürdag, E. Löffler, M. Orbay, M. Muhler. *Mat. Chem. Phys.* **86** (2004) 315-319. Effect of potassium on the physicochemical properties of molybdenum oxide catalyst supported on sol-gel alumina-zirconia.
- C. Freitag, S. Besselmann, E. Löffler, W. Grünert, F. Rosowski, M. Muhler. *Catal. Today* **91-92** (2004) 143-147. On the role of monomeric vanadyl species in toluene oxidation over V₂O₅/TiO₂ catalysts: a kinetic study using the TAP reactor.
- W. Xia, O. F.-K. Schlüter, M. Muhler. *Carbon* **42** (2004) 2735-2777. A novel morphology of vapor grown carbon microfibers: Connected hollow microcones.
- O. F.-K. Schlüter, B.I. Wehner, D. Hu, W. Xia, T. Quandt, G. Marginean, W. Brandl, M. Muhler. *Appl. Catal. A: General* **274** (2004) 71-77. The iron-catalyzed synthesis of carbon microfibers from methane: the influence of growth conditions on conversion, selectivity, morphology and structure of the fibers.
- S.G. Girol, T. Strunskus, M. Muhler, C. Wöll. *J. Phys. Chem. B* **108** (2004) 13736-13745. Reactivity of ZnO Surfaces toward Maleic Anhydride.
- M.K. Schröter, L. Khodeir, J. Hambrock, E. Löffler, M. Muhler, R.A. Fischer. *Langmuir* **20** (2004) 9453-9455. Redox Chemistry of Cu Colloids Probed by Adsorbed CO: An in Situ Attenuated Total Reflection Fourier Transform Infrared Study.
- M. Guraya, S. Sprenger, W. Rarog-Pilecka, D. Szmigiel, Z. Kowalczyk, M. Muhler. *Appl. Surf. Sci.* **238** (2004) 77-81. The effect of promoters on the electronic structure of ruthenium catalysts supported on carbon.
- M. Kurtz, N. Bauer, H. Wilmer, O. Hinrichsen, M. Muhler. *Chem. Eng. Technol.* **27** (2004) 1146-1150. Rational Catalyst Design of Methanol Synthesis Catalysts.
- R. Becker, H. Parala, F. Hippler, A. Birkner, C. Wöll, O. Hinrichsen, O.P. Tkachenko, K.V. Klementiev, W. Grünert, S. Schäfer, H. Wilmer, M. Muhler, R.A. Fischer. *Angew. Chem.* **116** (2004) 2899-2903. MOCVD-Beladung mesoporöser Silikatmatrizen mit Cu/ZnO: neuartige Trägerkatalysatoren für die Methanolsynthese. *Angew. Chem. Int. Ed.* **43** (2004) 2839-2842. MOCVD-Loading of Mesoporous Siliceous Matrices with Cu/ZnO: Supported Catalysts for Methanol Synthesis.
- J. Abmann, V. Narkhede, L. Khodeir, E. Löffler, O. Hinrichsen, A. Birkner, H. Over, M. Muhler. *J. Phys. Chem. B* **108** (2004) 14634 – 14642. On the Nature of the Active State of Supported Ruthenium Catalysts Used for the Oxidation of Carbon Monoxide: Steady-state and Transient Kinetics Combined with *in situ* Infrared Spectroscopy.
- J. Strunk, M. Bergmann, O. Hinrichsen, K. Fink, I. Hegemann, B. Meyer. *Chem.-Ing.-Tech.* **76** (2004) 1424-1425. Mikrokinetische Modellierung als Brücke zwischen Quantenchemie und Bilanzgleichungen.

- N. V. Kramareva, A. Yu Stakheev, K. V. Klementiev, W. Grünert, E. D. Finashina, L. M. Kustov, *J. Mol. Catal. A* **209** (2004) 97-106. Heterogenized Palladium Chitosan Complexes as Potential Catalysts in Oxidation Reactions: Structural Investigation
- W. Grünert, R. Schlögl, in "Molecular Sieves - Science and Technology", H. G. Karge, J. Weitkamp, eds., vol. 4: Characterization I, Springer Berlin, 2004, 467-515. Photoelectron Spectroscopy of Zeolites
- L. Briand, O. P. Tkachenko, M. Guraya, I. E. Wachs, H. Hu, W. Grünert, *Surf. Interface Anal.* **36** (2004) 238-246. Methodical Aspects in the Surface Analysis of Supported Molybdena Catalysts
- L. Briand, O. P. Tkachenko, M. Guraya, X. Gao, I. E. Wachs, W. Grünert, *J. Phys. Chem. B* **108** (2004) 4823-4830. Surface-analytical Studies of Supported Vanadium Oxide Monolayer Catalysts
- W. Grünert, A. Brückner, H. Hofmeister, P. Claus, *J. Phys. Chem. B* **108** (2004) 5709-5717. Structural properties of Ag/TiO₂ catalysts for acrolein hydrogenation
- A. Yu. Stakheev, O. P. Tkachenko, G. I. Kapustin, N. S. Telegina, G. N. Baeva, T. R. Brueva, K. V. Klementiev, W. Grünert, L. M. Kustov, *Izv. RAN, Ser. Khim.* (2004), 502-511. (*Russian Chemical Bulletin*, Int. Ed. **53** (2004) 528-537). *PCCP* **5** (2003) 4736 – 4742. Izuchenie formirovaniya i stabilnosti metallicheskih nanochastich Pt i Pd na uglerodnom nositele. (Study of the formation and stability of Pt and Pd metallic nanoparticles on carbon support)
- T. Sowade, T. Liese, C. Schmidt, F.-W. Schütze, X. Yu, H. Berndt, W. Grünert, *J. Catal.* **225** (2004) 105-115. Relations between Structure and Catalytic Activity of Ce-In-ZSM-5 Catalysts for the Selective Reduction of NO by Methane. II. Interplay between the CeO₂ promoter and different indium sites
- M. Santhosh Kumar, M. Schwidder, W. Grünert, A. Brückner, *J. Catal.* **227** (2004) 384-397. On the nature of different iron sites and their catalytic role in Fe-ZSM-5 DeNO_x catalysts: New insight by a combined EPR and UV/VIS spectroscopic approach
- D. V. Peryshkov, E. A. Goodilin, I. A. Presnyakov, K. D. Didenko, Yu. D. Tretyakov, A. Birkner, W. Grünert, *Mendeleev Commun* (2004) 161. Thermal instability of a cation-disordered NdBa₂Cu₃O₇ semiconductor
- M. Felderhoff, K. Klementiev, W. Grünert, B. Spliethoff, B. Tesche, J. M. Bellosta von Colbe, B. Bogdanovic, M. Härtel, A. Pommerin, F. Schüth, C. Weidenthaler, *PCCP* **6** (2004) 4369-4374. Combined TEM-EDX and XAFS studies of Ti-doped sodium alanate
- T. Sowade, F.-W. Schütze, H. Berndt, W. Grünert, *Chem. Eng. Technol.* **27** (2004) 1277-1289. Kinetic reaction models for the Selective Reduction of NO by Methane over Multifunctional Catalysts Containing CeO₂ and/or In Species on ZSM-5 Zeolite
- M. Schwidder, F. Heinrich, M. Santhosh Kumar, A. Brückner, W. Grünert, *Stud. Surf. Sci. Catal.* **154** (2004) 2484-2492. Fe-ZSM-5 Catalysts for the Selective Reduction of NO: Influence of Preparation Route on Structure and Catalytic Activity
- O. P. Tkachenko, K. V. Klementiev, N. Koc, X. Yu, M. Bandyopadhyay, S. Grabowski, H. Gies, W. Grünert, *Stud. Surf. Sci. Catal.* **154** (2004) 1670-1678. The reduction of copper in porous matrices
- H. Gies, S. Grabowski, W. Grünert, *Stud. Surf. Sci. Catal.* **154** (2004) 2869-2875. Micro-mesoporous MCM-48 synthesised with metal-substituted zeolite seeds

Biochemie 1

- D. Koper-Emde, L. Herrmann, B. Sandrock and B.J. Benecke, *Biol.Chem.* **385** (2004) 791-794. RNA interference by small hairpin RNAs synthesized under control of the human 7S K RNA promoter.
- I. Paarmann, D. Frermann, B.U. Keller, C. Villmann, H.G. Breiting, M. Hollmann *Journal of Neurochemistry*, *in press*. Kinetics and subunit composition of NMDA receptors in respiratory-related neurons.

Biochemie 2

- B. Feldhaus, I. Dietzel, R. Heumann, R. Berger, *J. Soc. Gynecol. Investig.* **11** (2004) 89-96. Effects of Interferon-gamma and TNF-alpha on survival and differentiation of oligodendrocyte progenitors.
- M. Dzietko, U. Felderhoff-Mueser, M. Siffringer, B. Krutz, P. Bittigau, F. Thor, R. Heumann, Ch. Bühner, Ch. Ikonomidou, H.H. Hansen, *Neurobiol. Dis.* **15** (2004) 177-187. Erythropoietin protects the developing brain against N-methyl-D-aspartate receptor antagonist neurotoxicity.
- H.H. Hansen, T. Briem, M. Dzietko, M. Siffringer, A. Voss, W. Rzeski, B. Zdzisinska, F. Thor, R. Heumann, A. Stepulak, P. Bittigau, Ch. Ikonomidou, *Neurobiol. Dis.* **16** (2004) 440-53. Mechanisms leading to disseminated apoptosis following NMDA receptor blockade in the developing rat brain
- T. Arendt, G. Seeger, G. Barmashenko, K. Palm, T. Mittmann, L. Yan, M. Hümmeke, J. Behrbohm, R.H. Kamdem, M.K. Brückner, U. Gärtner, M. Holzer, P. Wahle, R. Heumann, *Eur. J. Neurosci.* **19** (2004) 2953-66. Neuronal activation of Ras regulates synaptic connectivity.
- U. Gärtner, A. Alpar, G. Seeger, R. Heumann, Th. Arendt, *Int. J. Dev. Neurosci.* **22** (2004) 165-73. Enhanced Ras activity in pyramidal neurons induces cellular hypertrophy and changes in afferent and intrinsic connectivity in synRas mice.
- T. Welzel, I. Radtke, W. Meyer-Zaika, R. Heumann, M. Epple, *J. Mat. Chem.* **14** (2004) 2213-2217. Transfection of cells with custom-made calcium phosphate nanoparticles coated with DNA
- U. Felderhoff-Mueser, P. Bittigau, M. Siffringer, B. Jarosz, E. Korobowicz, L. Mahler, T. Piening, A. Moysich, T. Grune, F. Thor, R. Heumann, Ch. Bühner, Ch. Ikonomidou, *Neurobiol. Dis.* **17** (2004) 273-82. Oxygen causes cell death in the developing brain.
- B. Feldhaus, I. Dietzel, R. Heumann, B. Berger, *Zentralbl. Gynakol.* **126** (2004) 282-5. Corticoids protect oligodendrocyte precursor cells against cytokine-induced damage
- U. Gärtner, A. Alpar, F. Reimann, G. Seeger, R. Heumann, T. Arendt, *J. Neurosci. Res.* **77** (2004) 630-41. Constitutive Ras activity induces hippocampal hypertrophy and remodeling of pyramidal neurons in synRas mice.
- G. Seeger, L. Yan, U. Gärtner, M. Hümmeke, G. Barmashenko, T. Mittmann, R. Heumann, T. Arendt, *Neuroreport.* **15** (2004) 2651-4. Activation of Ras in neurons modifies synaptic vesicle docking and release.
- A. Blöchl, L. Blumenstein, R.M. Ahmadian, *J. Europ. Neurosci.* **20** (2004) 2321-2335. Inactivation and activation of Ras by the neurotrophin receptor p75.
- S. Isik, M. Etienne, J. Oni, A. Blöchl, S. Reiter, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **76** (2004) 6389-6394. Dual microelectrodes for distance control and detection of nitric oxide from endothelial cells by means of scanning electrochemical microscope.

- J. Oni, A. Pailleret, S. Isik, N. Diab, I. Radtke, A. Blöchl, M. Jackson, F. Bedioui, W. Schuhmann, *ABC – Analytical and Bioanalytical Chemistry* **378** (2004) 1594-1600. An array of functionalised electrodes for the detection of nitric oxide released by endothelial cells using different NO-sensing chemistries.
- G. Hoffmann, I.D. Dietzel *Neuroscience* **125** (2004) 369-379. Thyroid hormone regulates excitability in central neurons from postnatal rats.
- M. Etienne, A. Schulte, S. Mann, G. Jordan, I.D. Dietzel, W. Schuhmann *Anal. Chem.* **76** (2004) 3682-3688. Constant-distance mode scanning potentiometry. I. Visualization of Calcium carbonate dissolution in aqueous solution.
- S. Mann, P. Happel, G. Hoffmann, I. D. Dietzel *GIT Imaging & Microscopy*, **6** (2004) 40-42,; Imaging living cells with scanning ion-conductance microscopy. - *Bioforum* **27** (2004) 33-35. Abbildung lebender Zellen mit Hilfe der SICM.

Didaktik der Chemie

- K. Töpfer, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **15** (2004) 84, 26-29. Salicylsäuremethylester – Der Geruch nach „Wintergrünöl“.
- K. Sommer, S. Venke, *Unterricht Chemie* **15** (2004) 84, 18-21. Coffein – Einfache Experimente zur Isolierung eines Naturstoffs.
- P. Pfeifer, K. Sommer, S. Venke, *Unterricht Chemie* **15** (2004) 84, 4-7. Naturstoffe im Chemieunterricht (Basisartikel).
- B. Donner, K. Sommer, *PdN-Chemie in der Schule* **53** (2004) 6, 21-27. Vom sensorischen Test zur quantitativen Bestimmung – am Beispiel Brühwürfel.
- K. Sommer, P. Pfeifer, *PdN-Chemie in der Schule* **53** (2004) 4, 21-27. Trendgetränke und praxisorientierter Chemieunterricht – Anwendungsbezüge für chemisches Basiswissen.
- K. Sommer, P. Pfeifer, *Unterricht Chemie* **15** (2004) 79, 41-43. Chemisches Grundwissen anwenden.
- K. Sommer, *Unterricht Chemie* **15** (2004) 79, 28-31. Methanol im Wein – Panscherei oder Naturprodukt?
- K. Lehmeyer, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **15** (2004) 79, 36-40. Wie wirkt ein ACE-Saft?
- K. Sommer, E. Graf, *Unterricht Chemie* **15** (2004) 79, 4-9. Chemisches Wissen anwenden (Basisartikel).
- Lehrerhandbuch zum Schülerbuch „H₂O & Co“ für die Realschule. Oldenbourg Verlag, München 2004 (Organische Chemie) (Autorentätigkeit)
- z.e.u.s. Materialien Chemie. Hrsg. von B. Duvinage. Aulis Verlag, Köln 2004 (Band 3) (Autorentätigkeit)



Ruhr Universität Bochum
Fakultät für Chemie

IPP made in Germany 
International Postgraduate Programmes
Internationale Promotionsprogramme



Graduate School of Chemistry and Biochemistry (GSCB)

Die fakultätsweite Graduate School of Chemistry and Biochemistry (GSCB) bietet jungen Wissenschaftlern das komplette Spektrum der modernen Chemie: vom Design und der Aufklärung molekularer Strukturen bis hin zu neuen Materialien und den Biowissenschaften. Kernstück der GSCB ist ein strukturierter Promotionsstudiengang, der auf einem international kompatiblen 3(+1) Modell basiert: Studierende mit einem sehr guten Bachelor- oder Fachhochschulabschluß können nach einem einjährigen Vorbereitungsstudium direkt in das dreijährige Forschungsstudium zum *Dr. rer. nat.* einsteigen, für welches normalerweise ein Diplom- bzw. Master-Abschluß Voraussetzung ist. Die Doktoranden der GSCB profitieren von einem anspruchsvollen Curriculum, englischsprachigen Lehrveranstaltungen und internationalem Umfeld. Sie werden darüber hinaus fachlich und außerfachlich intensiv betreut. Für ausländische Doktoranden bietet die GSCB spezielle Deutschkurse, Unterstützung bei Einreise, Behördengängen und Wohnungssuche an.

Ziel der GSCB ist es, eine qualitativ hochwertige Ausbildung in angemessener Zeit zu ermöglichen und optimale Bedingungen für die Spitzenforschung zu schaffen. Als *Internationales Promotionsprogramm* (IPP) und ausgewiesenes Zentrum wissenschaftlicher Exzellenz erhält die GSCB eine fünfjährige Anschubfinanzierung des Deutschen Akademischen Austauschdienstes und der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Programms „Promotion an Hochschulen in Deutschland“.

Die Graduate School hat derzeit 120 Mitglieder (Stand 03/2005), von denen 30% ausländischer Herkunft sind, und wird voraussichtlich im Wintersemester 2005/2006 mit insgesamt 180 - 200 Doktoranden im Promotionsstudiengang ihren Vollausbau erreichen.

Weitere Infos:

Dr. Thomas Koch
Wissenschaftlicher Koordinator
Graduate School of Chemistry and Biochemistry
Ruhr-Universität Bochum (NC 02/169)
D-44780 Bochum

FON: +49 (0) 234 32 24374 oder 26908

FAX: +49 (0) 234 32 14749

URL: www.ruhr-uni-bochum.de/gscb

Promotionen in der Fakultät für Chemie
01.01.2004 bis 31.12.2004

Aßmann, Jens

Ruthenium als Oxidationskatalysator - IR-spektroskopische und kinetische Untersuchung der Oxidation von CO -

Disputation: 21.06.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. Muhler

Beernink, Gunda

Charakterisierung organischer Dünnschichten auf Metalloberflächen

Disputation: 28.06.2004

1. Referent: Prof. Dr. Ch. Wöll

Blumenstein, Lars

Rho-Effektor-Interaktion: Struktur-Funktionsbeziehungen

Disputation: 20.07.2004

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Chamrad, Daniel

Bioinformatische Verfahren zur Analyse von Primärstrukturinformation mittels massen-spektrometrischer Daten in der Proteomanalyse

Disputation: 16.06.2004

1. Referent: Prof. Dr. H. E. Meyer

Cramer, Janina

Funktionelle Charakterisierung der RNA-abhängigen RNA-Polymerase des Hepatitis-C-Virus - Untersuchung molekularer Mechanismen der Substratspezifität von DNA-abhängigen DNA-Polymerasen -

Disputation: 15.06.2004

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Dormeyer, Wilma

Die biochemische Analyse der Proteinacetylierung am Beispiel des HIV-1 Tat Proteins

Disputation: 27.02.2004

1. Referent: Prof. Dr. H. E. Meyer

Freitag, Katrin

Darstellung und Charakterisierung metallbeladener Nafion^R/Silikat-Verbundwerkstoffe

Disputation: 29.01.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. T. Reetz

Gencaslan, Susan

DNA-Wechselwirkungen von intercalierenden bimetallischen (η^5 -C₅Me₅)Ir(III)- und aminplatin(II)haltigen Peptidkomplexen

Disputation: 03.05.2004

1. Referent: Prof. Dr. W. S. Sheldrick

Ghosh, Agnidipta

Relationship between function and 3D-structure of interferon inducible GTPases

Disputation: 09.02.2004

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Gil Girol, Stefanie

Adsorption von Maleinsäureanhydrid auf Zinkoxid

Disputation: 28.06.2004

1. Referent: Prof. Dr. Ch. Wöll

Gmerek, Andreas

Etablierung eines durch Verletzung induzierbaren Promotors

Disputation: 29.07.2004

1. Referent: Prof. Dr. R. Heumann

Gonschorowsky, Miriam

Beiträge zur Chemie hydrophiler Phosphane

Disputation: 09.12.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. Driß

Gunia, Markus

Spektroskopische Untersuchungen an Diazoverbindungen und Carbenen auf Metalloberflächen

Disputation: 06.02.2004

1. Referent: Prof. Dr. Ch. Wöll

Hantschel, Oliver

Structural and Functional Analysis of the Non-Receptor Tyrosine Kinase c-Abl

Disputation: 29.01.2004

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Heller, Maik

Synthese und Struktur zur selektiven Ionenaufnahme befähigter ionophorer kupfer-(I)-halogenidhaltiger Koordinationspolymere unter Verwendung von α,ω -Dithiol- sowie Thiakronenetherliganden

Disputation: 03.05.2004

1. Referent: Prof. Dr. W. S. Sheldrick

Häusler, Lars

Aktivierung von GTPasen der Rho-Familie

Disputation: 27.07.2004

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Kahms, Martin

Graduierte Analyse der Ras-vermittelten Signaltransduktion in Systemen unterschiedlicher Komplexität

Disputation: 07.12.2004

1. Referent: Priv.-Doz. Dr. J. Kuhlmann

Kiener, Christoph

Verwendung von Hochdurchsatz-Methoden zur Untersuchung starker Metall-Träger-Wechselwirkungen bei Cu/ZnO-Katalysatoren für die Methanolsynthese

Disputation: 19.10.2004

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Klanner, Catharina

Evaluation of Descriptors for Solids

Disputation: 06.05.2004

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Koper-Emde, Dorota Elzbieta

Phylogenetische Heterogenität der 7S RNAs von Eukaryonten

Disputation: 30.01.2004

1. Referent: Prof. Dr. B.-J. Benecke

Krumm, Holger

Beiträge zur gerichteten Evolution von Hydrolasen

Disputation: 21.07.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. T. Reetz

Kunat, Martin

Molekularstrahlstreuung an Metall/Metalloxid-Systemen

Disputation: 17.06.2004

1. Referent: Prof. Dr. Ch. Wöll

Kurtz, Melanie

Die Bedeutung der Globalkinetik für die Entwicklung Cu-basierter Methanolkatalysatoren

Disputation: 06.02.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. Muhler

Lukas, Nina

Identifizierung und elektrophysiologische Charakterisierung von Mutationen im cardialen Ca^{2+} -Freisetzungskanal/Ryanodin-Rezeptor

Disputation: 03.02.2004

1. Referent: Prof. Dr. L. Heilmeyer

Manka, Sven

N-und C-terminale Metallierung und sequenzabhängige Spaltung von methioninhaltigen Peptiden durch Cisplatin

Disputation: 03.05.2004

1. Referent: Prof. Dr. W. S. Sheldrick

Marginean, Gabriela

Vopour Grown Carbon Fibres: Morphologie und plasmachemische Funktionalisierung

Disputation: 28.01.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. Muhler

Naumann, Kai

Synthetische Peptid-Konjugate in Replikations- und Translationsmodellen

Disputation: 09.03.2004

1. Referent: Prof. Dr. G. von Kiedrowski

Paetzold, Jens

Carbonsäuren als Startmaterialien in der Übergangsmetallkatalyse

Disputation: 22.07.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. T. Reetz

Pletsch, Andreas

Untersuchungen zur Gerichteten Evolution von Übergangsmetallkatalysatoren

Disputation: 22.06.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. T. Reetz

Radtke, Ina

VEGF-Rezeptor-spezifische Signaltransduktion über Ras und Stickstoffmonoxid in

Endothelzellen: Einfluss auf Tumorwachstum

Disputation: 06.12.2004

1. Referent: Prof. Dr. R. Heumann

Schiwon, Robert

Cavity Enhanced Absorption Spectroscopy von dünnen Filmen mit Ferninfrarotstrahlung

Disputation: 26.07.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. Havenith-Newen

Schlüter, Oliver Felix-Karl

Die Synthese und Charakterisierung von geträgerten Palladiumkatalysatoren durch die chemische Gasphasenabscheidung von metallorganischen Verbindungen im Wirbelschichtreaktor

Disputation: 22.06.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. Muhler

Schäfer, Heike

Untersuchung der Proteinalterung am Beispiel des α A-Crystallins der Augenlinse mittels proteomanalytischer Methoden

Disputation: 19.07.2004

1. Referent: Prof. Dr. H. E. Meyer

Siebert, Marc

Protonentransfer im d_1 -Ameisensäuredimer - Laserspektroskopische Untersuchung eines quantenmechanischen Effektes in der Gasphase -

Disputation: 26.07.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. Havenith-Newen

Stowasser, Frank

Strukturelle Charakterisierung von Galliumnitrid-Nanopartikeln

Disputation: 24.06.2004

1. Referent: Prof. Dr. R. A. Fischer

Söhnchen, Sandra

Charakterisierung der Morphologie und Epitaxie mittels OMBD präparierter organischer Schichten auf Cu(110)

Disputation: 23.07.2004

1. Referent: Prof. Dr. Ch. Wöll

Teutenberg, Thorsten

Neue Methodenentwicklung in der Flüssigchromatografie durch Anwendung der Hochtemperaturtechnik mit subkristischen wässrigen mobilen Phasen - Konstruktive Aspekte eines speziellen Heizsystems -

Disputation: 02.02.2004

1. Referent: Prof. Dr. H.-J. Götze

Todadze, Ekaterina

Die silberkatalysierte Gasphasenepoxidation von Alkenen

Disputation: 21.06.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. Muhler

Turcu, Eugen Florin

Micropatterning and microelectrochemical characterisation of biological recognition elements

Disputation: 20.07.2004

1. Referent: Prof. Dr. W. Schuhmann

Tönshoff, Christina

Untersuchungen zur Photochemie von Kryptandsystemen mit Phenylaziden und p-Benzochinondiaziden als funktionellen Gruppen

Disputation: 10.12.2004

1. Referent: PD Dr. G. Bucher

Wiesenhöfer, Wolfgang

Neue Methoden zur Anwendung von Lipasen in der organischen Synthese

Disputation: 22.07.2004

1. Referent: Prof. Dr. M. T. Reetz

Winkler, Michael

Beiträge zur Chemie benzoider Reaktionsintermediate

Disputation: 15.06.2004

1. Referent: Prof. Dr. W. Sander

Ziegler, Slava

Identifizierung und Charakterisierung neuer tumorrelevanter Gene, die unter Kontrolle des Wnt- β -Catenin-Signalwegs stehen

Disputation: 15.06.2004

1. Referent: PD Dr. Oliver Müller