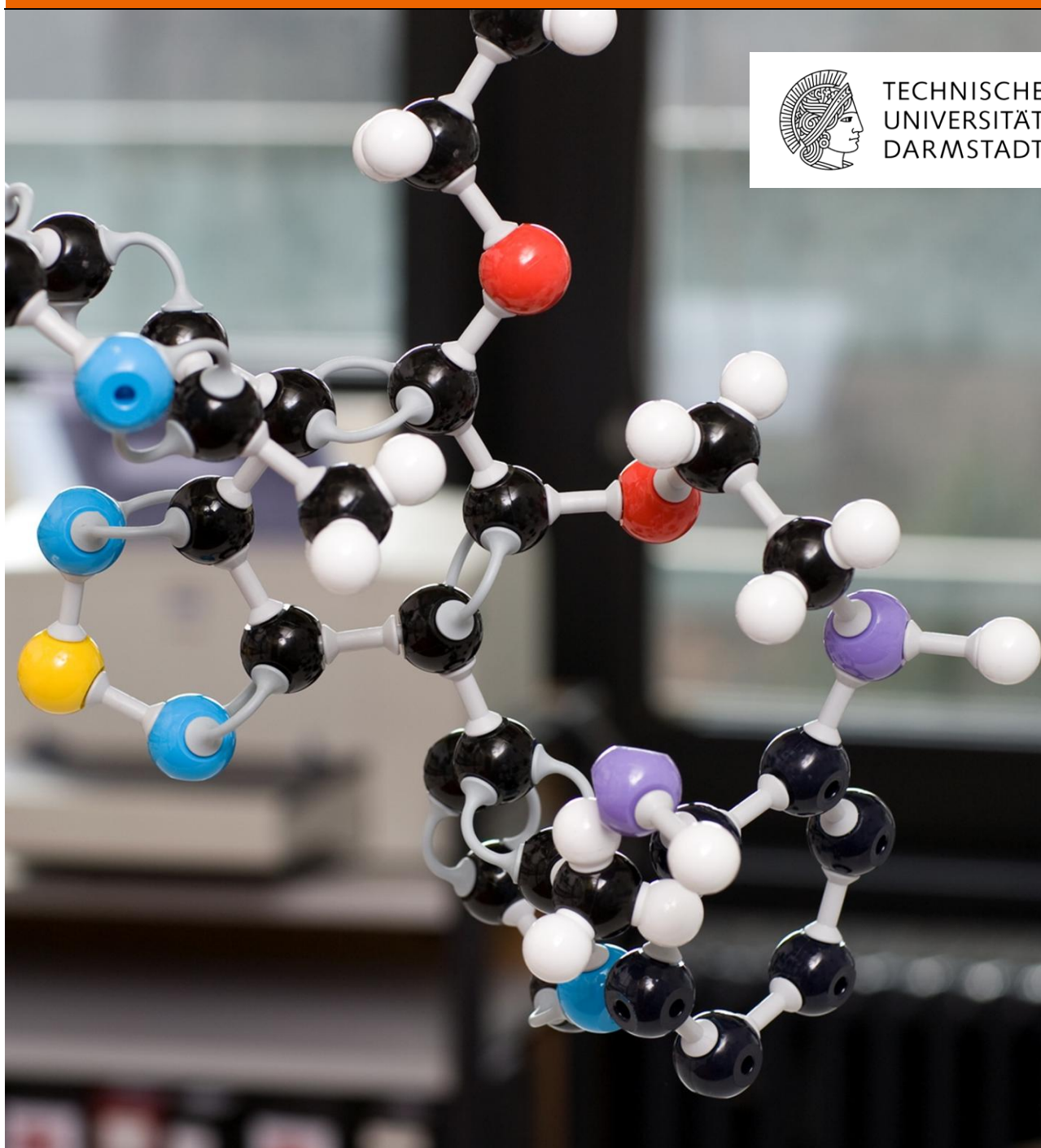


Fachbereich Chemie

Forschungsbericht 2012



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT





TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

Impressum

Herausgeber

Fachbereich Chemie der TU Darmstadt
Petersenstraße 22, L2|02
64287 Darmstadt
Phone: +49(0)6151/16-3773
Fax: +49(0)6151/16-4073

Redaktion

Prof. Dr. Florian Müller-Plathe
Dr.-Ing. Sabine Minol

Titelfoto

Modell eines Benzothiadiazol-Derivats; Foto: Katrin Binner

1. Inhaltsverzeichnis

1. Inhaltsverzeichnis.....	i-ii
2. Chronik 2012	3
3. Kurz-Statistik.....	5
4. Arbeitsgruppen-Kurzprofile.....	6
4.1. Clemens-Schöpf-Institut für Organische Chemie und Biochemie.....	6
4.1.1. Biochemie	6
4.1.2. Organische Chemie.....	7
4.2. Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie	8
4.2.1. Anorganische Chemie	8
4.2.2. Physikalische Chemie	8
4.3. Ernst-Berl-Institut für Technische und Makromolekulare Chemie	10
4.3.1. Technische Chemie.....	10
4.3.2. Makromolekulare Chemie.....	11
5. Habilitationen, Promotionen, Diplom-, Master- und Bachelorarbeiten 2012.....	13
5.1. Habilitationen	13
5.2. Promotionen	13
5.3. Diplom- und Masterarbeiten.....	15
5.4. Bachelorarbeiten.....	16
6. Ergangene Rufe und Verbleib der Alumni	17
6.1. Ergangene Rufe.....	17
6.2. Verbleib der Alumni	17
7. Kolloquiumsvorträge	18
7.1. Gesellschaft Deutscher Chemiker – Ortsverband Darmstadt.....	18
7.2. Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie	19
7.3. Clemens-Schöpf-Institut für Organische Chemie und Biochemie.....	21
7.4. Ernst-Berl-Institut für Technische Chemie und Makromolekulare Chemie.....	22
7.5. Bereich Kunststoffe des Fraunhofer LBF	23
7.6. Ausgewählte Gastredner außerhalb der Kolloquien	24
8. Auswärtige wissenschaftliche Vorträge der Arbeitsgruppenmitglieder	26
9. Veröffentlichungen nach Arbeitsgruppen	28
9.1. Anorganische Chemie.....	28
9.2. Physikalische Chemie	30
9.3. Technische Chemie	36
9.4. Makromolekulare Chemie	38
9.5. Organische Chemie	40
9.6. Biochemie	44

10. Patente.....	47
10.1. Neuanmeldungen 2012.....	47
10.2. Bestand an erteilten Patenten und Ersterteilungen 2012	47
11. Herausgeberrtätigkeiten.....	48
12. Drittmittel	49
12.1. Ausgewiesene Drittmittel und Verteilung nach Geldgeber-Gruppen.....	49
12.2. Versteckte Drittmittel.....	49
12.3. Gesamte Drittmittel 2012.....	50
12.4. Neu eingeworbene Drittmittel	50
13. Stipendiaten und GastwissenschaftlerInnen am Fachbereich Chemie	51
14. Extern beschäftigte MitarbeiterInnen des Fachbereichs Chemie	53
15. Preise und Ehrungen an Mitglieder des Fachbereichs 2012	56
16. Beteiligung an laufenden Verbundprojekten	59
17. Kooperationen.....	62
18. Veranstaltungen	63
19. Außenwirkung.....	65
19.1. Beratungstätigkeit für Firmen, Verbände, etc.	68
20. Laufende und geplante Forschungsvorhaben	69
21. Transfer von Forschungsleistungen in die Wirtschaft 2012	76
21.1. Bestehende Firmenausgründungen.....	76
21.2. Dienstleistungen und Auftragsforschung	76

2. Chronik 2012

Das hat es lange nicht mehr am Fachbereich Chemie gegeben: ein Jahr ohne Neuberufungen. Trotzdem bedeutet dies nicht, dass 2012 nichts passiert ist. Eine große Veränderung betrifft das Deutsche Kunststoffinstitut (DKI), das seine Struktur als industriegestütztes Forschungszentrum aufgibt und am 01.07.2012 als neuer „Bereich Kunststoffe“ in das Fraunhofer Institut für Betriebsfestigkeit und Systemzuverlässigkeit LBF eingegliedert wurde. Mit Unterstützung der Hessischen Landesregierung, der TU Darmstadt und der Industrie entsteht ein neues Institut, das im Bereich Kunststoffe und Leichtbau bundesweit einzigartig über eine geschlossene Kompetenzkette von der Material- und Werkstoffentwicklung bis in die Systemprüfung verfügt. Argument für die DKI-Integration ist die zunehmende Abhängigkeit technologischer Innovationen von der Verfügbarkeit geeigneter Werkstoffe. Kunststoffe bieten im Hinblick auf Energieeffizienz und Leichtbau vielfältige Vorteile, z.B. in Straßen-, Schienen- und Schiffsverkehr, Luftfahrt, Bauwesen, und Elektrotechnik. Anspruch des neuen LBF-Bereichs Kunststoffe ist daher, die Kompetenz in allen Fragestellungen, die hochwertige Kunststoffanwendungen vor allem im mobilen Leichtbau mit sich bringen, unter einem Dach zu vereinigen. Wirtschaftspolitisch bemerkenswert bleibt der Rückzug der chemischen und Kunststoffindustrie, die das alte DKI gemeinsam über die Forschungsgesellschaft Kunststoffe e.V. betrieb und es nun in staatliche Finanzierung und Kontrolle abgibt. Prof. Matthias Rehahn (Makromolekulare Chemie) leitet den neuen Bereich Kunststoffe am LBF weiterhin in Personalunion, wie bisher das DKI. Leitprojekte, die in Fortsetzung der DKI-Tradition in Zusammenarbeit mit dem Fachbereich Chemie erfolgen, befassen sich mit der Entwicklung hochwertiger (Thermomechanik, Haptik, Optik), langlebiger (z.B. Licht-, Witterungs-, Medien-, mechanische Beständigkeit) und den Sicherheitsanforderungen (z.B. Brandverhalten, Crashverhalten, Flüchte) genügender Konstruktionswerkstoffe auf Hochleistungs-Thermoplast- und Reaktionsharz-Basis. Hinzu kommen Aktivitäten zu Kunststoff-Verbundsystemen und durch funktionale Füllstoffe elektrisch und/oder thermisch leitfähig eingestellten Kunststoffen.



Foto: Fraunhofer LBF



Foto: Sabine Minol

Auch von der Sanierung gibt es Neues zu berichten. Im Frühjahr 2012 wird der erste fertige Bauabschnitt, der F-Turm, endlich bezogen, nachdem die großen und kleinen Mängel behoben waren (einige Eigenheiten waren erst den Endnutzern während der Abnahme aufgefallen, zum Beispiel die nach innen öffnenden Fluchttüren). Der neue Abschnitt ist schön und hell geworden, ein kleiner Ausgleich für die Mühen des Umzugs. Ein Mitarbeiter schreibt dazu: „... das Umzugsgeschehen unseres Arbeitskreises hat uns 2012 monatelang auf tiefliegende Fundamente der Forschung rückgeführt. Wir haben Einblicke in die Medienversorgung gewinnen können, die uns bisher so noch nicht vergönnt waren.“ Ab Sommer 2012 begann die Sanierung des E-Turms, des Mittelabschnitts des Gebäudeteiles. Angeblich werden Wetten auf seine Bauzeit abgeschlossen, nachdem der F-Turm das Doppelte der veranschlagten Sanierungszeit benötigte.

Im Juni erschienen die Resultate der zweiten Runde der Bundes-Exzellenzinitiative. Für die einen ein Grund zum Jubeln: Die TU Darmstadt erhält den Zuschlag für die Graduiertenschule für Energiewissenschaft und Energietechnik. Dies stärkt die Aktivitäten im Bereich Energie der TU Darmstadt, die im Energy Center gebündelt sind. Aus der Chemie sind Frau Prof. Barbara Albert und Prof. Herbert Vogel an diesem schönen Erfolg beteiligt. Auf der anderen Seite steht die Nicht-Verlängerung des Exzellenzclusters Center of Smart Interfaces, mit der niemand wirklich gerechnet hat. Angesichts der plötzlich wegbrechenden Drittmittelsumme bleibt unter dem Strich für die TU Darmstadt ein herber Schlag ins Kontor. Die Landespolitik machte sehr deutlich, dass sie der TU in dieser Situation nicht beispringen wird. Im Fachbereich Chemie sind vier Arbeitsgruppen direkt betroffen, über die Landesmittelzuweisung nach dem MIR-Modell aber auch der Fachbereich in Gänze.

Der Fachbereich Chemie tritt mit einer Reihe von Veranstaltungen hervor, z.B. dem 2. Darmstädter Papierchemie Kolloquium, das am 25. und 26. Mai 2012 von der Arbeitsgruppe Prof. Markus Biesalski, gemeinsam mit dem Cellulose Chemiker Club Darmstadt (CCCD) ausgerichtet wurde, oder der 16. Vortragstagung der Fachgruppe Festkörperchemie und Materialforschung der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh), die unter dem Titel „Materialchemie für Energie- und Ressourcennutzung“ stattfand, 17.09.-19.09.2012 (Prof. Barbara Albert). Im Wortsinne überstrahlt wurden die wissenschaftlichen Veranstaltungen natürlich wieder von den Mitternachtsexperimenten im Herrngarten während des Heinerfests am 29.06.2012 (Dr. Reinhard Meusinger und Arbeitsgruppe Prof. Dr. Michael Reggelin).



Prof. Boris Schmidt erhält im November zusammen mit Prof. Thomas Misgeld (TU München) den renommierten Alzheimer-Forschungspreis der Frankfurter Hans und Ilse Breuer-Stiftung. Der Preis ist mit insgesamt 100.000 Euro die höchstdotierte Auszeichnung für Alzheimer-Forschung in Deutschland.

Der Sonderpreis der TU für ausgewählte Landespreisträger im Landeswettbewerb „Jugend forscht“ in Form eines zweiwöchigen Praktikums geht in diesem Jahr an zwei Chemikerinnen, so dass das Praktikum im Fachbereich Chemie bei Frau Prof. Katja Schmitz stattfand.



Florian Müller-Plathe, Prodekan

3. Kurz-Statistik

Menschen

Am 31.12.2012 waren in den Arbeitsgruppen am Fachbereich Chemie und im Chemie-bezogenen Teil des Fraunhofer LBF rund 377 Personen tätig. Von diesen waren

22	Professoren
1	Juniorprofessur
7	emeritierte/pensionierte Professoren (aktiv)
192	Doktoranden
37	Post-Doktoranden
2	Habilitanden
29	wissenschaftl. tätige Administrativ-Technische Mitarbeiter
139	Frauen
44	international (Hochschulabschluss im Ausland)
13	Stipendiaten (Emmy-Noether, Heisenberg, Humboldt, DAAD, Stiftungen, andere Quellen)
191	nicht durch TU-Stellen (Landesstellen) finanziert

Veröffentlichungen

Am Fachbereich entstanden 2012 215 neue Veröffentlichungen, davon 140 in begutachteten Fachzeitschriften, sowie 5 Patente. Die Veröffentlichungen der Professoren und Gruppenleiter wurden 2012 insgesamt 5812mal in der Literatur zitiert. Der mittlere H-Index der aktiven Professoren betrug 20. Einzelne Mitglieder des Fachbereichs wirkten als Editoren oder Board Members bei insgesamt 14 Zeitschriften.

Drittmittel (ohne Bereich Kunststoffe des Fraunhofer LBF)

Im Jahr 2012 liefen 110 Drittmittelprojekte (mit jeweils einem Personenjahr oder mehr Gesamtdauer). Mitglieder des Fachbereichs Chemie waren an 42 laufenden Verbundprojekten (davon 16 DFG-Sonderforschungsbereiche, -Schwerpunkte, -Graduiertenkollegs, 16 BMBF-Verbünde, 3 EU-Verbünde, 2 LOEWE und 5 weitere Verbünde) beteiligt. Im Jahr 2012 wurden Zusagen (Zuwendungsbescheide, Verträge) über etwa 3,46 Mio. € neu akquiriert.

Vorträge

102 externe Sprecher haben in der Chemie oder am Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe vorgetragen, davon 54 in den Kolloquien der Institute oder der Gesellschaft Deutscher Chemiker, Ortsverband Darmstadt. Umgekehrt haben Mitglieder des Fachbereichs 140 Vorträge auswärts gehalten.

Konferenzen, Workshops, Sommerschulen

Mitglieder des Fachbereichs haben 2012 selbst 20 Veranstaltungen organisiert oder mitorganisiert.

Wissenschaftlicher Nachwuchs

2012 wurden 74 Bachelorarbeiten (32 Frauen; 42 Männer), 41 Masterarbeiten (13 Frauen; 28 Männer), 15 Diplomarbeiten (3 Frauen; 12 Männer) und 35 Promotionen (8 Frauen; 27 Männer) am Fachbereich Chemie sowie eine Habilitation (Dr. Frédéric Leroy, PC) abgeschlossen. Hinzu kommen 2 Bachelorarbeiten und 3 Diplomarbeiten an anderen Fachbereichen oder Universitäten.

4. Arbeitsgruppen-Kurzprofile

4.1. Clemens-Schöpf-Institut für Organische Chemie und Biochemie

4.1.1. Biochemie

Prof. Dr. Norbert A. Dencher

Forschungsschwerpunkte der Arbeitsgruppe Physikalische Biochemie sind (a) die Biochemie und Physiologie des Alterns (Mitochondriale Metabolismen und Signalwege bei der Alterung und der Lebensspannenkontrolle - ein systembiologischer Ansatz (BMBF GerontoMitoSys)), (b) die Untersuchung der Struktur von Membranen und Membranproteinen mittels Neutronenstreuung. An einem eigenen Diffraktometer am Helmholtz-Zentrum Berlin erfolgen die Strukturuntersuchungen, einschließlich der Lokalisation von funktionell wichtigen Wassermolekülen. Die Dynamik von Membranen und Wasser wird charakterisiert mittels quasielastischer Neutronenstreuung im Zeitfenster von Femto- bis Nanosekunden. Weitere Schwerpunkte der Arbeiten sind die Untersuchung (c) der Strahlenwirkung auf Zellen und (d) Veränderungen von Mitochondrien bei der Alzheimer Demenz und der Parkinson Demenz als Biomarker und als Target zur Wirkstoffsuche.
www.chemie.tu-darmstadt.de/dencher

Prof. Dr. Peter Friedl

In der Arbeitsgruppe werden Techniken zur reversiblen Immortalisierung von Säugerzellen entwickelt und genetische Faktoren der Ausbildung von Mammakarzinomen untersucht.

Prof. Dr. Harald Kolmar

Im Zentrum der Forschungsinteressen steht die Entwicklung von Biomolekülen für die Anwendungen in Diagnostik und Therapie. Dabei stehen vor allem Peptide im Vordergrund. Ein weiteres Forschungsfeld im Bereich der Weißen Biotechnologie ist die Erzeugung von Enzymen mit maßgeschneiderten Eigenschaften.
www.chemie.tu-darmstadt.de/kolmar

Prof. Dr. Katja Schmitz

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit der Untersuchung von Chemokinen, Proteinen, welche die Zellwanderung bei Entzündungen steuern. Zu ihrer Inhibition werden Bibliotheken von Peptiden und Peptidanaloga an der Festphase synthetisiert und in verschiedenen Bindungsversuchen getestet. Dazu werden Proteine in rekombinanten Bakterien exprimiert, gereinigt und chemisch modifiziert. Zusätzlich werden Verfahren zur Herstellung von Proteinmustern auf Oberflächen entwickelt, die bestimmte Zellen zur Wanderung anregen.
www.chemie.tu-darmstadt.de/schmitz

4.1.2. Organische Chemie

Prof. Dr. Robert Berger

Die Arbeitsgruppe Quantenchemie und Theoretische Organische Chemie befasst sich mit der Entwicklung und Anwendung von elektronischen und vibronischen Strukturmethoden. Die Forschungsinteressen liegen in den Grenzgebieten zwischen Physik, Chemie und Biologie mit Schwerpunkten in den Bereichen der fundamentalen Symmetrien und fundamentalen Wechselwirkungen, der relativistischen Effekte, der theoretischen Spektroskopie, der molekularen und biomolekularen Chiralität, der Katalyse sowie der molekularen Eigenschaften und Materialeigenschaften.

<http://fias.uni-frankfurt.de/~berger/index>

Prof. Dr. Wolf-Dieter Fessner

Das Forschungsfeld der Bioorganischen und Synthetischen Chemie liegt in der Entwicklung effizienter chemo-enzymatischer Methoden für die Präparation chiraler, biologisch-aktiver Verbindungen.

www.oc.chemie.tu-darmstadt.de/index.php?bookmark=ak/fessner/index

PD Dr. Reinhard Meusinger - Servicegruppe NMR-Spektroskopie

Die Servicegruppe führt automatisierte Strukturaufklärung von Naturstoffen und synthetischen chemischen Verbindungen sowie von Stoffgemischen mit Hilfe der kernmagnetischen Resonanzspektroskopie (NMR) durch.

hactar.oc.chemie.tu-darmstadt.de/home

Prof. Dr. Michael Reggelin

Die Forschungsfelder liegen in der stöchiometrischen und katalytischen Anwendung von optisch aktiven Sulfoximinen, der Entwicklung und Anwendung von helikal-chiralen Polymeren in der Übergangsmetall- und der Organokatalyse sowie als neuartige Alignment-Medien zur Bestimmung anisotroper NMR-Parameter, der Totalsynthese von FAST-BLUE und Cylindricinen sowie der Synthese neuartiger Monomere für die Herstellung polymerer OLEDs.

depthought.oc.chemie.tu-darmstadt.de

Prof. Dr. Boris Schmidt

Die Arbeitsgruppe ist fokussiert auf die Entwicklung von Enzyminhibitoren und Diagnostika für Alzheimer-Demenz und Onkologie. Die Forschung beinhaltet Targetidentifizierung und Targetvalidierung, aber auch hit-to-lead Programme, Lead-Optimierung und proof-of-concept Studien und in vivo Toxikologie. Die chemisch-präparativen Schwerpunkte sind: 1- und 2-Photonenfluoreszenzfarbstoffe, Enzyminhibitoren für Sekretasen und Kinasen (GSK3, FLT3) und β -Faltblattliganden.

www1.tu-darmstadt.de/fb/ch/Fachgebiete/OC/AKSchmidt/TUD%20Boris%20Schmidt.htm

Prof. Dr. Christina M. Thiele

In der Arbeitsgruppe werden die dreidimensionalen Strukturen organischer Verbindungen mit Hilfe der Flüssigkeits-NMR-Spektroskopie untersucht. Zu diesem Zweck wird ein neuartiger anisotroper NMR-Parameter, die residuale dipolare Kopplung, verwendet. Die Anwendungsfelder reichen von der Bestimmung der relativen Konfiguration bis hin zur Untersuchung von Struktur und Dynamik katalytisch aktiver Spezies.

www.chemie.tu-darmstadt.de/thiele

4.2. Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie

4.2.1. Anorganische Chemie

Prof. Dr. Barbara Albert

In der Arbeitsgruppe werden auf dem Gebiet der anorganischen Festkörperchemie Substanzen - Boride, Cuprate, Silicate u.v.m. - synthetisiert und charakterisiert. Hierzu kommen insbesondere Hochtemperatur-Methoden zum Einsatz, und die Strukturen werden mittels Diffraktometrie, Elektronenmikroskopie etc. analysiert. Anorganische Materialien werden auf ihre Verwendbarkeit als Thermoelektrika, Leuchtstoffe, Supraleiter, Bio-Komposite, Hartstoffe oder Magnetwerkstoffe geprüft.

www.chemie.tu-darmstadt.de/albert

Prof. Dr. Herbert Plenio

Die Arbeitsgruppe befasst sich primär mit der Methodenentwicklung in der homogenen Katalyse. Dabei stehen die Ruthenium-vermittelte Olefin-Metathese sowie Palladium-vermittelte Kreuzkupplungsreaktionen im Zentrum der Forschung.

www.chemie.tu-darmstadt.de/plenio

Prof. Dr. Jörg J. Schneider

Die Arbeitsgebiete sind die Synthese und geordnete Strukturierung von Nanomaterialien wie z.B. Kohlenstoffnanoröhren, Graphen, nanoskaligen 1D und 2D Metalloxiden und die Untersuchung ihrer Struktur-Wirkungsbeziehungen in funktionalen Strukturen wie z.B. Sensoren, Aktoren als Speichermaterialien und katalytischen Reaktionen. Darüber hinaus werden maßgeschneiderte elektronentransferaktive Organometallkomplexe synthetisiert und charakterisiert.

www.chemie.tu-darmstadt.de/schneider

Prof. i.R. Dr. Hans-Friedrich Klein

Auf der Grundlage der bisher gesammelten Befunde über Metall-Kohlenstoff- und Metall-Wasserstoff-Bindungen werden neue Synthesekonzepte erarbeitet, wie regiospezifische Cyclometallierungen und Bicyclometallierungen sowie die Umwandlung von Ni(II)-H in Ni(I)-Verbindungen. Zudem werden mechanistische Vorstellungen zur Fischer-Tropsch-Synthese entwickelt.

www1.tu-darmstadt.de/fb/ch/Fachgebiete/AC/AKKlein/index.tud

4.2.2. Physikalische Chemie

Prof. i.R. Dr. Jürgen Brickmann

Der Schwerpunkt der Arbeit liegt in der Modell-Entwicklung und Simulation hierarchischer Strukturbildungen bei Biomineralisationsprozessen – von atomistischer Auflösung über Nanostrukturen bis hin zu makroskopischen Aggregaten.

www.molcad.com

Prof. Dr. Gerd Buntkowsky

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit der Anwendung und der methodischen Weiterentwicklung der hoch auflösenden Festkörper-NMR-Spektroskopie (SSNMR), mit Anwendung auf Probleme der chemischen Analytik, der biophysikalischen Chemie und der Materialwissenschaften. Die Forschungsschwerpunkte liegen im Bereich der Katalyse (heterogene Katalyse, Immobilisierung homogener Katalysatoren, Enzymkatalyse), der Untersuchung von Oberflächeneigenschaften und Oberflächenwechselwirkungen nano- und mesoskopischer Materialien, der Charakterisierung der Struktur und Dynamik weicher Materie und der Spektroskopie von Hybridmaterialien.

www.tu-darmstadt.de/buntkowsky

Prof. i.R. Dr. Wolfgang Haase

Die Forschungsschwerpunkte liegen in der Untersuchung der Displaytauglichkeit von Ferroelektrischen Flüssigkristallen (liquid crystals LC), zu physikalisch-chemischen Eigenschaften von flüssigkristallinen Nanokolloiden und deren Verhalten im Mikrowellengebiet sowie zur Elektrophorese von Mikropartikeln in anisotropen Medien. Weiterhin werden Untersuchungen an bioanorganisch relevanten Systemen mit Magnetisierungsmessungen, magnetischer Zirkulardichroismus-Spektroskopie und theoretische Modellberechnungen durchgeführt.

www.chemie.tu-darmstadt.de/haase

Prof. Dr. Christian Hess

Die Forschungsfelder liegen in der Oberflächenchemie von Nanomaterialien, heterogenen Katalyse, Sensorik, Batterieforschung und in situ- und operando-Spektroskopie. Neue funktionalisierte, nanostrukturierte Materialien werden entwickelt und als Modellsysteme eingesetzt, um mittels spektroskopischer Verfahren (Raman, UV-Vis, XPS) die Wirkungsweise von Katalysatoren (Partialoxidationen, NO_x-Speicherung), Metalloxidsensoren sowie Li-Ionen-Batterien zu untersuchen.

www.chemie.tu-darmstadt.de/hess

Prof. Dr. Florian Müller-Plathe

Die Hauptaktivität der Arbeitsgruppe Theoretische Physikalische Chemie liegt in der Computersimulation von Polymeren, Funktionswerkstoffen, Nanomaterialien und anderen Systemen, der so genannten weichen Materie, sowie von Fluiden und Grenzflächen. Dazu werden Simulationsmodelle, neue Verfahren der molekularen Simulation und Molekulardynamik-Software entwickelt, vor allem zur Beschreibung von Polymer-Grenzflächen, von Adsorptions- und Benetzungsphänomenen, von Transportprozessen und von mechanischen Eigenschaften von (Nano)Verbundmaterialien.

www.chemie.tu-darmstadt.de/mueller-plathe

Prof. Dr. Rolf Schäfer

Das Forschungsfeld liegt in der Untersuchung von Materie im Übergangsbereich zwischen isolierten Atomen und anorganischen Festkörpern. Von Interesse sind die magnetischen, dielektrischen, optischen, thermochemischen und photo-elektrokatalytischen Eigenschaften von isolierten und geträgerten Clustern.

www.chemie.tu-darmstadt.de/schaefer

Prof. Dr. Nico F.A. van der Vegt

Die Kernexpertise der Arbeitsgruppe Computergestützte Physikalische Chemie liegt im Bereich der molekularen Simulationen. Das Thema "Solvation" steht im Fokus der wissenschaftlichen Fragestellungen, die sich auf das Verständnis von thermodynamischen Wechselwirkungen in synthetischer und biologischer weicher Materie in Wasser richten. Untersucht werden responsive Polymere, Polyelektrolyte auf Mineraloberflächen, Oligopeptide an metallischen Oberflächen, schaltbare Polyelektrolytbürsten, spezifische Ionen Effekte und hydrophile/hydrophobe Wechselwirkungen in wässrigen Lösungen. Weitere Themen der Arbeitsgruppe im Bereich Polymere sind die Untersuchung von Polymeroberflächen und deren Benetzung/Solvatisierung und Gaspermeation (CO₂) in Gastrennungsmembranen basierend auf polymerisierbaren ionischen Flüssigkeiten.

www.cpc.tu-darmstadt.de

4.3. Ernst-Berl-Institut für Technische und Makromolekulare Chemie

4.3.1. Technische Chemie

Prof. Dr. Markus Busch

Forschungsschwerpunkt ist die Untersuchung der Kopplung von Prozessführung und polymerer Mikrostruktur. Hierzu werden zwei Polymerisations-Pilotanlagen bei Drücken bis 2500 bar und Temperaturen bis 300 °C betrieben. Die Experimente werden durch Modellierungen begleitet, die zur Klärung des Reaktionsmechanismus, der Planung von Experimenten, dem Design von Produkten oder der Interpretation von Experimenten dienen können. Weiterhin werden sicherheitstechnische Untersuchungen zur Stabilität von Reaktionsmischungen bei bis zu 4000 bar und 400 °C ausgeführt.

www.chemie.tu-darmstadt.de/busch

Prof. Dr. Peter Claus

Das Hauptarbeitsgebiet des Lehrstuhls Technische Chemie II ist auf die Heterogene Katalyse und wissensbasierte (rationale) Katalysatorentwicklung ausgerichtet. Die dabei durchgeführte Synthese, physikalisch-chemische Charakterisierung und Anwendung von Katalysatoren (für selektive Hydrierung und Oxidation, Autoabgaskatalyse) wird ergänzt durch Hochdurchsatzmethoden, kinetische Modellierung, neue Materialien und Nachhaltige Chemie mit einer starken Betonung auf die chemokatalytische Umsetzung nachwachsender Rohstoffe.

www.chemie.tu-darmstadt.de/claus

Prof. em. Dr. Johann Gaube

Das Arbeitsgebiet umfasst die Kinetik und Reaktionsführung der Fischer-Tropsch-Synthese und Studien zur Wechselbeziehung der Hydrierung und Isomerisierung ungesättigter Hydrocarbonen, insbesondere die Hydrierung von 1,5,9-cis, trans, trans-Cyclododecatrien zu Cyclododecen.

www.chemie.tu-darmstadt.de/tc/technischechemie/emeritus_1/gaube

Prof. i.R. Dr. Gerhard Luft

Die theoretischen Forschungsarbeiten liegen auf dem Gebiet der Zersetzung von Ethen und Mischungen mit Verunreinigungen unter Hochdruck.

www.chemie.tu-darmstadt.de/tc/technischechemie/emeritus_1/luft

Prof. Dr. Herbert Vogel

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit der selektiven Defunktionalisierung von nachwachsenden Rohstoffen mit Hilfe von Katalyse und Green Solvents (bevorzugt nah- und überkritisches Wasser), dem rationalen Katalysatordesign mittels *in situ* Methoden wie DRIFTS, TG/DTA-MS und instationären Kinetikmethoden wie temperatur- und konzentrationsprogrammierten Reaktionen sowie Isotopenaustauschmethoden.

www.chemie.tu-darmstadt.de/vogel

4.3.2. Makromolekulare Chemie

Prof. Dr. Markus Biesalski

Die Anbindung funktionaler Polymere an Ober- und Grenzflächen sowie hierdurch zugängliche, maßgeschneiderte Grenzflächeneigenschaften, wie z.B. Adhäsion oder Benetzung, sind ein Grundlagenfokus der Forschungsarbeiten in der Arbeitsgruppe. Dabei rücken in jüngerer Vergangenheit auch „schaltbare“, d.h. auf externe Stimuli wie Licht, oder elektrische/magnetische Felder dynamisch reagierende Oberflächen zunehmend in den Blickpunkt. In mehr anwendungsnahen Arbeiten werden schließlich funktionale Papiere für die Mikrofluidik und Papierbasierte Komposite als Leichtbaumaterialien entwickelt. Seit 2012 wird die Arbeitsgruppe durch Herrn Dr. Zhang verstärkt, der seine Expertise im Bereich der Cellulosechemie mit in die Forschung der Arbeitsgruppe durch eigene Beiträge einbringt.

www.chemie.tu-darmstadt.de/biesalski

Jun. Prof. Dr. Annette Brunsen

Der Forschungsschwerpunkt der Arbeitsgruppe ist die Herstellung und Funktionalisierung von anorganischen, mesoporösen Membranen, mit dem Ziel, Transportprozesse durch derartige Hybridmembranen zu manipulieren und zu verstehen. Das Interesse gilt hierbei der Grenzflächenfunktionalisierung mit (schaltbaren) Polymeren im Confinement, der lokal selektiven Funktionalisierung, sowie der Charakterisierung solcher Hybridmaterialien, z.B. mittels Oberflächenplasmonen- und optischer Leckwellenleitermoden Spektroskopie. „Geschicktes“ Design durch gezieltes Ausnutzen und Kombinieren von Funktionen in solchen Hybrid-Membranen wird dabei zur Schaltung, Richtung und Selektivität von Transportprozessen genutzt.

www.chemie.tu-darmstadt.de/brunsen

Prof. Dr. Matthias Rehahn

Im Fachgebiet Chemie der Polymeren gilt die Forschung (a) der Entwicklung funktionaler Polymere (elektrisch (halb)leitend, Ionen leitend, Licht emittierend) für die Optoelektronik, Photovoltaik und Brennstoffzellen, (b) im Design und der Herstellung von Polymeren mit definierter Morphologie auf der Mikro- und Nanometerskala (insbesondere Blockcopolymere, auch mit funktionalen Blöcken) sowie (c) der Entwicklung neuartiger Konzepte und Materialien für die maßgeschneiderte Verbindung zwischen Polymeren und anorganischen Komponenten.

www.chemie.tu-darmstadt.de/rehahn

Bereich Kunststoffe des Fraunhofer LBF (ehemals DKI)

Das industriegetragene Deutsche Kunststoffinstitut (DKI) gliederte sich zum 01.07.2012 als neuer „Bereich Kunststoffe“ in das Fraunhofer Institut für Betriebsfestigkeit und Systemzuverlässigkeit LBF ein. Mit Unterstützung der Hessischen Landesregierung, der TU Darmstadt und der Industrie ist ein neues Institut entstanden, das im Bereich Kunststoffe und Leichtbau bundesweit einzigartig über eine geschlossene Kompetenzkette von der Material- und Werkstoffentwicklung bis in die Systemprüfung verfügt.

Hintergrund der DKI-Integration war die Feststellung, dass technologische Innovationen zentral von der Verfügbarkeit geeigneter Werkstoffe abhängen. Kunststoffe bieten im Hinblick auf Energieeffizienz und Leichtbau vielfältige Möglichkeiten. Beispiele finden sich im Automobilbau, dem Schienen- und Schiffsverkehr, dem Bauwesen, der Luftfahrt und der Elektrotechnik. Anspruch des neuen LBF-Bereichs Kunststoffe ist daher, die Kompetenz zur Bearbeitung aller Fragestellungen, die hochwertige Kunststoffanwendungen vor allem im mobilen Leichtbau mit sich bringen, unter einem Dach zu vereinigen.

Leitprojekte, die in Fortsetzung alter DKI-Tradition in Zusammenarbeit mit dem Fachbereich Chemie der TU Darmstadt erfolgen, befassen sich mit der Entwicklung hochwertiger (Thermomechanik, Haptik, Optik), langlebiger (z. B. Licht-, Witterungs-, Medien-, mechanische Beständigkeit) und den Sicherheitsanforderungen (z.B. Brandverhalten, Crashverhalten, Flüchte) genügender Konstruktionswerkstoffe auf Hochleistungs-Thermoplast- und Reaktionsharz-Basis. Hinzu kommen Aktivitäten zu Kunststoff-Verbundsystemen und durch funktionale Füllstoffe elektrisch und/oder thermisch leitfähig eingestellten Kunststoffen.

www.lbf.fraunhofer.de/de/kunststoffe.html

5. Habilitationen, Promotionen, Diplom-, Master- und Bachelorarbeiten 2012

Zeitraum 01.01.2012 – 31.12.2012

5.1. Habilitationen

Dr. Frédéric Leroy (Fachgebiet Prof. Dr. F. Müller-Plathe), *Determination and Molecular Understanding of the Surface Free Energies of Solid-Liquid Interfaces*. Habilitation im Fach Physikalische Chemie am 09.07.2012.

5.2. Promotionen

Gesamt: 35 Abschlüsse (Frauen: 8, Männer: 27) an der TU Darmstadt

Al Samman, Michael, *Development of Two-Dimensional Chromatographic Methods for the Separation and Characterization of Polyesters of Different Degrees of Branching*, Prof. Pasch (MC), Januar 2012

Bauer, Peter Moritz, *Heterogen katalysierte Hydrierung und Isomerisierung von Linolsäure zu konjugierten Linolsäuren*, Prof. Claus (TC), Januar 2012

Bienholz, Arne M., *Hydrogenolyse von Glycerol an heterogenen Kupfer- und Rutheniumkatalysatoren*, Prof. Claus (TC), Juli 2012

Boländer, Alexander, *Synthese und Evaluation fluoreszenter Sonden für nichtinvasive Diagnoseverfahren der Alzheimer-Demenz*, Prof. Schmidt (OC), August 2012

Brini, Emiliano, *Conditional Reversible Work method: a novel approach to obtain pair potentials for coarse-grained simulation of soft matter*, Prof. van der Vegt (PC), November 2012

Bruhn, Gerd, *Farben von Titanaten des Freudenbergit-Strukturtyps*, Prof. Albert (AC), Dezember 2012

Burlon, Konrad, *Blockcopolymere als Haftvermittler für Kunststoff-Metallverbände*, Prof. Rehahn (MC), Juli 2012

Dias Borges Vianna, Sullivan, *The influence of solid surfaces on the structure and dynamics of polymer melts*, Prof. Müller-Plathe (PC), April 2012

Empting, Martin, *Disubstituted 1,2,3-Triazoles: A Multitool for Biomolecular Chemistry*, Prof. Kolmar (BC), Dezember 2012

Fabritz, Sebastian, *Bioconjugation of Peptides on Cube-octameric Silsesquioxanes*, Prof. Kolmar (BC), Dezember 2012

Ghanbari, Azadeh, *Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations of Silica Polystyrene Nanocomposite*, Prof. Müller-Plathe (PC), Mai 2012

Ginzburg, Martin, *Development of High Temperature Two Dimensional Liquid Chromatography of Polyolefins*, Prof. Rehahn (MC), Dezember 2012

Gokhale, Rishikesh V., *Synthesis and Characterization of Polymer Coated, Self-Assembled Peptide Nanotubes- towards Tailor-Made Soft Nanorods*, Prof. Biesalski (MC), April 2012

Hartwig, Ali, *Über die Polymerisationsinhibierung von Acrylsäure mit Phenothiazin und Sauerstoff*, Prof. Vogel (TC), Juli 2012

Heil, Stefanie, *Evolutive Optimierung mikrobieller Lipasen und Esterasen in Hinblick auf Substratspezifität und Enantioselektivität*, Prof. Kolmar (BC), Oktober 2012

Heiles, Sven, *Strukturdiskriminierung kleiner anorganischer Cluster durch evolutionäre Algorithmen in Kombination mit elektrischen Ablenkmessungen*, Prof. Schäfer (PC), Oktober 2012

Herbers, Claudia R., *Hierarchical modelling of surface interactions: Towards the simulation of polymer coating systems*, Prof. van der Vegt (PC), Juni 2012

Jekewitz, Tim, *Über die Performance der heterogen katalysierten Partialoxidation von Acrolein zu Acrylsäure an modifizierten Mo/V/W-Mischoxidkatalysatoren*, Prof. Vogel (TC), Dezember 2012

Kramer, Thomas, *Glykogen Synthase Kinase-3-Inhibitoren. Design, Synthese und Optimierung sowie die Evaluation in Modellen der Alzheimer-Krankheit*, Prof. Schmidt (OC), Dezember 2012

Lo Monte, Fabio, *Design, Synthese und Optimierung von GSK-3-Inhibitoren und ihre Evaluation in Modellen der Alzheimer-Demenz*, Prof. Schmidt (OC), Mai 2012

Meyer, Nils-Christopher, *Helikal chirale Polyacetylene in Katalyse und Analytik*, Prof. Reggelin (OC), April 2012

Öztürk, Gökhan, *Hochgefüllte Graphit-Polymer-Compounds für Einsätze im Wärmemanagement*, Prof. Rehahn (MC), Juli 2012

Paschke, Maren, *Entwicklung biotechnologischer Werkzeuge zur enzymkatalysierten Produktion makrozyklischer Moschusriechstoffe*, Prof. Kolmar (BC), Juli 2012

Peeck, Lars Henrik, *Synthese neuer Rutheniumkomplexe für effiziente Ringschlussmetathese und schaltbare ringöffnende Metathese-Polymerisation*, Prof. Plenio (AC), Juli 2012

Presser, Jonas, *Neue Komponenten für das generative Fertigungsverfahren des 3D-Drucks*, Prof. Rehahn (MC), Januar 2012

Rades, Steffi, *Synthese und Charakterisierung von Nanopartikeln im System Eisen-Bor*, Prof. Albert (AC), Januar 2012

Rahimi, Mohammad, *Hybrid Molecular Dynamics – Continuum Mechanics for Polymers*, Prof. Müller-Plathe (PC), Dezember 2012

Rhiel, Laura, *Nicht-kovalente Oberflächenpräsentation von Antikörpern auf Hefezellen*, Prof. Kolmar (BC), Dezember 2012

Scholz, Johannes, *Stereoreguläre, helikal chirale Polychinoxalin(2,3-diyl)e mit tropos-Biacrylachsen als Brønsted-Säuren in der symmetrischen Organokatalyse*, Prof. Reggelin (OC), Juni 2012

Schütz, Marco, *Polydibenzosuberene – Eine neue Klasse polymerer Emitter*, Prof. Rehahn (MC), Oktober 2012

Soler, Andrea, *Über die Dehydratisierung von Polyolen in nah- und überkritischem Wasser*, Prof. Vogel (TC), Januar 2012

Stober, Frederick C., *Synthese, Charakterisierung und Untersuchung thermoelektrischer Eigenschaften ausgewählter Metallboride*, Prof. Albert (AC), Juni 2012

Tomaszowski, Michael, *Neue Miniproteininhhibitoren gegen die humane Typ II Transmembranserineprotease Matriptase (MT-SP1)*, Prof. Kolmar (BC), Oktober 2012

Zall, Andrea, *Entwicklung und Synthese von Protease-Inhibitoren und –Modulatoren in Modellen der Alzheimer-Demenz und Tumorerkrankungen*, Prof. Schmidt (OC), Mai 2012

Yi, Dong, *Enzymatic Properties and Directed Evolution of Transketolase and Chemoenzymatic Synthesis of neo-Sialoconjugates*, Prof. Fessner (OC), Dezember 2012

5.3. Diplom- und Masterarbeiten

Im Jahr 2012 wurden am Fachbereich Chemie insgesamt 15 Diplomarbeiten (Frauen: 3, Männer: 12) und 37 Masterarbeiten (Frauen: 9, Männer: 28) im Studiengang Chemie und 4 Masterarbeiten (BC, w) im Studiengang Biomolecular Engineering abgeschlossen, die Zahl verteilt sich folgendermaßen auf die einzelnen Fachgebiete:

Diplomarbeiten		Masterarbeiten	
Anorganische Chemie	3	Anorganische Chemie	5
Biochemie	1	Biochemie	13
Makromolekulare Chemie	2	Makromolekulare Chemie	5
Organische Chemie	1	Organische Chemie	5
Physikalische Chemie	2	Physikalische Chemie	3
Technische Chemie	6	Technische Chemie	10

Hinzu kommen 3 Diplomarbeiten, die an anderen Universitäten abgeschlossen wurden.

5.4. Bachelorarbeiten

Im Jahr 2012 wurden am Fachbereich Chemie insgesamt 51 Bachelorarbeiten (Frauen: 16; Männer: 35) im Studiengang Chemie abgeschlossen. Die Zahl der Abschlüsse verteilt sich folgendermaßen auf die einzelnen Fachgebiete:

Anorganische Chemie:	7
Biochemie:	5
Makromolekulare Chemie	8
Organische Chemie:	5
Physikalische Chemie:	12
Technische Chemie:	14

Im Studiengang Biomolecular Engineering wurden 2012 insgesamt 25 Bachelorarbeiten (Frauen: 18, Männer: 7) abgeschlossen; 9 in der Biochemie, 1 in der Organischen Chemie und 13 im Fachbereich Biologie und 2 an einer anderen Universität.

6. Ergangene Rufe und Verbleib der Alumni

6.1. Ergangene Rufe

Dr. Ganesh Balasubramanian, Fachgebiet Physikalische Chemie (Prof. Müller-Plathe), Ruf auf eine Professur für Mechanical Engineering, University of Iowa, Ames, USA

6.2. Verbleib der Alumni

Von 32 erfassten Alumni (mehrheitlich Doktoranden, aber auch Post-Docs, Stipendiaten, etc.) fanden nach Verlassen der TU Darmstadt eine erste Beschäftigung in

Industrie	22
Wirtschaft, nicht Industrie	2
Akadem. Forschung	8
Verwaltung, Behörden	-
Elternzeit/arbeitslos/unbekannt	-

7. Kolloquiumsvorträge

7.1. Gesellschaft Deutscher Chemiker – Ortsverband Darmstadt

26. Januar 2012

Prof. Dr. Julius Vancso, Professur für Oberflächentechnik, University of Twente, Niederlande

Responsive polymer grafts across the length scales

31. Januar 2012

Prof. Dr. Horst Stöcker, Wissenschaftlicher Geschäftsführer, GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung, Darmstadt

Forschung bei GSI und FAIR: Neue Elemente, neue Phasen, neue Materialien

7. Februar 2012

Prof. Dr. Henning von Philipsborn, Fakultät für Physik, Universität Regensburg

Strahlende Gläser, Glasuren und Farben

17. April 2012

Prof. Dr. Rainer Haag, Institut für Chemie und Biochemie, Freie Universität Berlin

Molekulare Bäume – Vom Reagenzglas zur Anwendung

8. Mai 2012

Dr. Bernhard Nick, BASF SE, Ludwigshafen

Chemische Produktion - die Kunst, Komplexität effizient zu managen

5. Juni 2012

Prof. Dr. Ulrich Fischer, Kompetenzzentrum für Weinforschung, DLR Rheinpfalz

Aromastoffe im Wein: Herkunft, Nachweis und sensorische Wahrnehmung

12. Juni 2012

Dr. Matthias Schäfer, Evonik Industries AG, Hanau

Intellectual Property and Know-How Management

26. Juni 2012

Prof. Dr. Barry M. Trost, Department of Chemistry, Stanford University, California, USA

The Alkyne Strategie for the Synthesis of Bioactive Targets

3. Juli 2012

Prof. Dr. Peter Bäumler, Vizepräsident für Forschung, Institutsdirektor Institut für Organische Chemie II und Neue Materialien, Universität Ulm

Sonnige Zeiten für die Organische Photovoltaik

6. November 2012

Wilhelm-Jost-Gedächtnisvorlesung

Prof. Dr. Katharina Kohse-Höinghaus, Universität Bielefeld

Physikalische Chemie: Diagnostik am Puls chemischer Veränderung

20. November 2012

Dr. Hans-Josef Ritzert, Regional President Greater China, Evonik Industries AG, China

Ein deutscher Chemiker in China

4. Dezember 2012

Prof. Dr. Dirk Bunke, Öko-Institut e.V., Freiburg

Nachhaltige Chemie – Green chemistry, REACH und mehr...

7.2. Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie

11. Januar 2012

Prof. Dr. Joachim Dzubiella, Institut weiche Materie und funktionale Materialien, Helmholtz Zentrum Berlin

Modeling hydration and ion-specific effects in protein folding and association

18. Januar 2012

Prof. Dr. Bernd Smarsly, Physikalisch-Chemisches Institut, Justus-Liebig-Universität Gießen

Anorganische Nanostrukturen: Kleine Strukturen in großer Form?!

25. Januar 2012

Dr. Frédéric Leroy, Theoretische Physikalische Chemie, TU Darmstadt

Einführungsvortrag: Molecular modeling of nanoscale wetting phenomena

1. Februar 2012

Prof. Dr. Markus Arndt, Physikalische Fakultät, Universität Wien, Österreich

Macroscopic coherence of organic molecules: On the relation between chemistry and fundamental quantum physics

2. Mai 2012

Alarich-Weiss-Preis-Verleihung

Prof. Dr. Reinhard Schomäcker, Chemisches Institut, TU Berlin

Der Rohstoffwandel in der chemischen Industrie – Eine Herausforderung für die Entwicklung neuer katalytischer Prozesse

23. Mai 2012

Prof. Dr. Cordt Zollfrank, Fachgebiet Biogene Polymere, Wissenschaftszentrum Straubing, TU München

Anorganische Funktionsmaterialien mit Biotemplaten

30. Mai 2012

Prof. Dr. Karl-Michael Weitzel, Philipps-Universität Marburg, Fachbereich Chemie, Physikalische Chemie

Ionen-transport durch Festkörperelektrolyte und Polymerfilme

6. Juni 2012

Prof. Dr. Juri Grin, Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden
Chemische Bindung in thermoelektrischen Materialien

13. Juni 2012

Dr. Christina S. Birkel, Chemistry Department & Materials Research Laboratory, University of California, Santa Barbara, USA
Rapid microwave synthesis and investigation of ternary thermoelectrics adopting the half-Heusler crystal structure

13. Juni 2012

Prof. Dr. Roy Johnston, School of Chemistry, University of Birmingham, UK
Computational studies of nanoalloy clusters: Two metals can be better than one at the nanoscale

20. Juni 2012

Dr. Manuel Alcarazo, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mühlheim/Ruhr
Synthesis, Structure and Applications of Carbene-Stabilized Phosphorus(III)-Centered Cations

27. Juni 2012

Prof. Dr. Marcus Bäumer, Institut für Angewandte und Physikalische Chemie, Universität Bremen
Nanoporous Gold: From an ancient technology to a high-tech material

11. Juli 2012

Prof. Dr. Stanislav Gorb, Zoologisches Institut, Christian-Albrechts-Universität, Kiel
Insect inspired adhesives: Where are we now?

17. Oktober 2012

Prof. Dr. Ruth Lynden-Bell, Department of Chemistry, University of Cambridge, UK
Simulation studies of Screening by Ionic Liquids near charged walls

31. Oktober 2012

Dr. Frédéric Leroy, Theoretische Physikalische Chemie, TU Darmstadt
Benetzungsvorgänge im Lichte molekularer Simulationen

6. November 2012

Wilhelm-Jost-Vorlesung
Prof. Dr. Katharina Kohse-Höinghaus, Physikalische Chemie, Universität Bielefeld
Physikalische Chemie: Diagnostik am Puls chemischer Veränderungen

5. Dezember 2012

Dr. Florian Kraus, Anorganische Chemie, Fluorchemie, TU München
Über die Ammonolyse von Halogeniden und das natürliche Vorkommen von F_2

7.3. Clemens-Schöpf-Institut für Organische Chemie und Biochemie

23. Januar 2012

Prof. Dr. Roderich Süßmuth, Biologische Chemie, Technische Universität Berlin

Neue Peptidwirkstoffe aus der Natur – Leistungsfähigkeit und Grenzen ribosomaler und nicht-ribosomaler Biosynthesewege

23. April 2012

Dr. Nuno Maulide, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim/Ruhr

Harnessing molecular rearrangements for C-C bond formation

15. Mai 2012

Dr. Jürgen Eck, B.R.A.I.N AG, Zwingenberg

Weißer Biotechnologie: Von natürlicher Biodiversität zu industriellen „Designer Bugs“

21. Mai 2012

Prof. Dr. Jürgen Seibel, Institut für Organische Chemie, Universität Würzburg

Sweet Life?

11. Juni 2012

Dr. Andreas Hochheimer, B.R.A.I.N AG, Zwingenberg

Zellbiologie des Geschmacks: Forschung an Geschmackszellen

18. Juni 2012

Prof. Dr. Laurence Hecquet, Université Blaise Pascal, Aubière, Frankreich

Applications of transketolase, a thiamine pyrophosphate enzyme, in biocatalysis and in assay development

29. Oktober 2012

Prof. Dr. Frank Schulz, Technische Universität Dortmund

Chemomicrobial Synthesis of Natural Products: A Happy Marriage between Organic Synthesis and Biochemistry

26. November 2012

Prof. Dr. Gerhard Hilt, Philipps-Universität Marburg

Die vielseitigen Aspekte moderner Kobaltchemie: Multi-Komponenten-Reaktionen, Naturstoffsynthese, Polycarbonylverbindungen und Graphene

10. Dezember 2012

Dr. Daniel B. Werz, Georg-August-Universität Göttingen

Von spannenden Reaktionen mit gespannten Systemen bis zu Pd-katalysierten Reaktionen an Kohlenhydraten

7.4. Ernst-Berl-Institut für Technische Chemie und Makromolekulare Chemie

10. Januar 2012

Dr. Raimund Horn, Fritz-Haber-Institut Berlin

Catalytic and Non-Catalytic Methane Oxidation at High Temperatures: Mechanistic Insight by Combination of In Situ Experiments and Kinetic Simulations

24. Januar 2012

Prof. Dr.-Ing. Irina Smirnova, Institut für Thermische Verfahrenstechnik, Technische Universität Hamburg-Harburg

Die leichtesten Feststoffe der Welt: Herstellung und Anwendung von Aerogelen auf der Basis von anorganischen und organischen Polymeren

26. Januar 2012

Prof. Dr. Julius Vancso, Chair, Department of Chemical Technology, University of Twente, Niederlande

Responsive polymer grafts across the length scales

24. April 2012

Prof. Dr. Wolfgang Fischer, Institute of Biophotonics, School of Biomedical Science and Engineering, National Yang-Ming University Taipei, Taiwan

Computational Modeling – Dynamics of Viral Membrane Proteins

2. Mai 2012

Alarich-Weiss-Preis-Verleihung

Prof. Dr. Reinhard Schomäcker, Chemisches Institut, TU Berlin

Der Rohstoffwandel in der chemischen Industrie – Eine Herausforderung für die Entwicklung neuer katalytischer Prozesse

15. Mai 2012

Prof. Dr. Ulrich Jonas, Makromolekulare Chemie, Universität Siegen

Building Hierarchical Structures with Soft Matters

25. Mai 2012

2. Darmstädter Papierchemie Kolloquium und 52. CCCD-Jahrestagung

Prof. Dr. Steffen Fischer, TU Dresden

Neue Aspekte zu Nanocellulose

Dr. Hermann Seyffer, BASF SE, Ludwigshafen

Mineralölbarrieren für Lebensmittelverpackungen

Dr. Wolfgang Schmidt, Felix Schöller Osnabrück

Trägermaterial für gedruckte Elektronik

29. Mai 2012

Prof. Dr. Christian Paulik, Head of Institute, Johannes Kepler, Universität Linz, Österreich

Controlling polyolefin properties by in-reactor blending

10. Juli 2012

Dr. Olaf Wachsen, Head of group process development, Clariant Produkte (Deutschland) GmbH

Angewandte Reaktionstechnik in der Chemischen Industrie

16. Oktober 2012

Dr. Wilfried Rähse, Henkel AG, Heidelberg

Produkt- und Verfahrensentwicklung sowie die Produktion von Wirkprodukten am Beispiel von Cosmeceuticals

11. Dezember 2012

Dr. Alessandro Moretto, Department of Chemistry, University of Padova, Italien

Peptides in nanotechnologies: smart rotaxanes, materials, self-assembly and microstructures formation

18. Dezember 2012

Prof. Dr. Johann Gaube, Ernst-Berl-Institut, Technische Universität Darmstadt

Fischer-Tropsch-Synthese für Treibstoffe und Chemie-Rohstoffe

7.5. Bereich Kunststoffe des Fraunhofer LBF (ehemals DKI)

12. Januar 2012

Prof. Dr. Axel Müller, Universität Bayreuth

Neue Nanostrukturen durch Selbstorganisation von Triblock-Terpolymeren

26. Januar 2012

Prof. Dr. Markus Stommel, LPW, Universität Saarbrücken

Simulation von glasfaserverstärkten Kunststoffen auf Basis mikromechanischer Homogenisierung

9. Februar 2012

Dr. Andreas Maurer, 3M ESPE AG, Seefeld

Polymere in der Dentalwelt

7.6. Ausgewählte Gastredner außerhalb der Kolloquien

AG Prof. Berger (gesamt 7)

Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Mieczyslaw Makosza, Institute of Organic Chemistry, Polish Academy of Science, Warschau, Polen

Nucleophilic Substitution of Hydrogen in Electron-Deficient Arenes. Missing Part of the Aromatic Substitution Puzzle, Mai 2012

Dr. Vladimir Malkin, Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Science, Bratislava, Slovakia

Relativistic calculations of NMR and EPR parameters, Oktober 2012

Prof. Dr. Hermann Stoll, Institute for Theoretical Chemistry, University of Stuttgart

Local increments for solids, Dezember 2012

AG Prof. Biesalski (gesamt 11)

Prof. Steffen Fischer, TU Dresden

Nanocellulosen, Herstellung und Einsatz, Mai 2012

AG Prof. Müller-Plathe (gesamt 8)

Prof. Dr. Roser Valenti, Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt

Ab initio study of physisorption of organometallic complexes on silica, Dezember 2012

Prof. Dr. Yuichi Masubuchi, Kyoto University, Japan

Modeling of entangled polymer dynamics, Juli 2012

Prof. Dr. Toshihiro Kawakatsu, Tohoku University, Japan

Hybrid dynamic density functional theories for self-assembling amphiphilic molecule, März 2012

AG Prof. Reggelin (gesamt 13)

Prof. Dr. Peter Wipf, Department of Chemistry, University of Pittsburgh, USA

Computational solutions for stereochemical problems in organic synthesis, Dezember 2012

Prof. Dr. Roberto R. Gil, Carnegie Mellon University Pittsburgh, USA

Structural analysis of natural and photochemically generated compounds assisted by residual dipolar couplings, Dezember 2012

Dr. Philippe Lesot, University of Paris-Sud, France

Development and application of $^2\text{H}/^{13}\text{C}$ heteronuclear correlation 2D experiments in chiral anisotropic media: from enriched molecules to natural abundance level, Dezember 2012

AG Prof. Schmidt (gesamt 1)

Dr. Peter-Michael Kloetzel, Charité Berlin

20S proteasome structure-function relationships in cellular and immunological processes, November 2012

AG Prof. Thiele (gesamt 1)

Viktor Bahutski, Postdoctoral research associate, University of Manchester

Enantiospecific Homologations of Boronic Esters with Chiral Secondary Carbamates Towards C-Tertiary Boronic Esters – Chiral Building Blocks of High Enantiopurity, April 2012

AG Prof. van der Vegt (gesamt 3)

Prof. Dr. Wim Briels, University of Twente, Niederlande

Including memory in Brownian dynamics simulations of soft matter rheology, Februar 2012

Dr. Reinier Akkermans, Accelrys Inc., Cambridge, UK

Multiscale modeling with Materials Studio, Februar 2012

Dr. Bob Hoomans, Research at DSM Geleen, Niederlande

Research at DSM Geleen, Februar 2012

8. Auswärtige wissenschaftliche Vorträge der Arbeitsgruppenmitglieder

Im Jahr 2012 wurden insgesamt 140 auswärtige wissenschaftliche Vorträge der Arbeitsgruppenmitglieder gehalten. Aufgeführt ist lediglich ein Vortrag bei einer Konferenz.

Prof. Dr. B. Albert (gesamt 14)

1st International GIGAKU Conference in Nagaoka (IGCN), *Metal Borides as Ferromagnets, Thermoelectric and Hard Materials, or Superconductors*, Nagaoka University of Technology (NUT), Nagaoka, Nijjata, Japan, Februar 2012

Prof. Dr. R. Berger (gesamt 6)

TACC 2012, *Broken symmetry approaches for symmetry violation, Theory and Application of Computational Chemistry*, Pavia, Italien, September 2012

Prof. Dr. M. Biesalski (gesamt 10)

ICPPB Intl. Conference, *Designing microfabricated paper devices through tailored polymer attachment*, Nanjing, China, November 2012

Jun. Prof. A. Brunsen (gesamt 3)

AIT, *Polymer-Functionalized Mesoporous Films: Towards Gated and Directed Permselectivity*, Wien, Österreich, Juli 2012

Prof. Dr. G. Buntkowsky (gesamt 13)

11. Workshop Festkörper-NMR-Methoden und Anwendungen in der Materialforschung, *Solid State NMR Studies of Catalysts: From Nano-Catalysts to Enzyme Models*, Oberjoch, Juli/August 2012

Prof. Dr. M. Busch (gesamt 4)

GÖCh, *Produktentwicklung in der Hochdruck-Polymerisationstechnik – Möglichkeiten simulationsgestützten Produktdesigns*, Linz, Österreich, Februar 2012

Prof. Dr. P. Claus (gesamt 6)

62nd Canadian Chemical Engineering Conference, *A Green Route for the Selective Hydrogenation of Benzene to Cyclohexene*, Vancouver, Kanada, Oktober 2012

Prof. Dr. N.A. Dencher (gesamt 8)

International Symposium of Asian Association of Ageing Research, *Age-related changes in abundance, activity, posttranslational modification and supramolecular assembly of OxPhos enzymes*, Fukuoka, Japan, August 2012

Prof. Dr. W.-D. Fessner (gesamt 2)

ESBES 2012, *Enzymes catalyzing asymmetric carboligation: Directed evolution of substrate scope for industrial applications*, Istanbul, Türkei, September 2012

Prof. i.R. Dr. W. Haase (gesamt 7)

19th National Conference on Liquid Crystals, *Electrophoretic motion of dielectric microparticles in Nematic Liquid Crystals*, Patiala, Indien, November 2012

Prof. Dr. C. Hess (gesamt 2)

Südwestdeutscher Katalyse-Lehrverband, *In situ Raman Spectroscopy of Catalysts*, Darmstadt, September 2012

Prof. Dr. F. Müller-Plathe (gesamt 17)

EURADH 2012, *Polymer Interphases Studied at Molecular Resolution by Multiscale Simulation*, Friedrichshafen, September 2012

Hon. Prof. Dr. S. Neumann (gesamt 3)

Symposium der slowenischen Gesellschaft für Stammzellforschung, *Problems and perspectives in translation of functional genomics in tumour therapy*, Ljubljana, Slowenien, Februar 2012

Prof. Dr. H. Plenio (gesamt 3)

244th American Chemical Society National Meeting & Exposition "Materials for Health and Medicine", *On the ethenolysis of rubber, N-Heterocyclic Carbenes in Catalysis*, Philadelphia, USA, August 2012

Prof. Dr. M. Reggelin (gesamt 3)

SMASH Conference, *Helically Chiral Polyacetylenes as Enantiodifferentiating Alignment Media*, USA, Dezember 2012

Prof. Dr. M. Rehahn (gesamt 2)

Elektrisch leitfähige Polymere, Universität Stuttgart, Februar 2012

Prof. Dr. R. Schäfer (gesamt 6)

Fond der Chemischen Industrie, *Elektrische Ablenkungsmessungen anorganischer Cluster in der Gasphase*, Heidelberg, Februar 2012

Prof. Dr. B. Schmidt (gesamt 3)

Orion Pharma, *Vorstellung und Vortrag der Kinaseprogramme des Arbeitskreises: GSK3, LRRK2, Sondierung von Kooperationen*, Helsinki, Finnland, Juni 2012

Prof. Dr. K. Schmitz (gesamt 4)

Sino German Frontiers of Chemistry Symposium, *Chemical tools to manipulate leukocytes*, Peking, China, September 2012

Prof. Dr. J.J. Schneider (gesamt 4)

International Conference on Advanced Nanomaterials, *Molecular routes to transparent metal oxides. Materials for electronics and sensing*, Chennai, Indien, Oktober 2012

Prof. Dr. C.M. Thiele (gesamt 4)

Sino-German Frontiers of Chemistry Meeting, *Residual Dipolar Couplings as Novel NMR Restraints for Organic Structure Determination*, Peking, China, September 2012

Prof. Dr. N.F.A. van der Vegt (gesamt 8)

6th international conference on multiscale materials modeling, *From atomistic to mesoscale simulations: Free energy-based potentials for soft matter simulations*, Singapur, Oktober 2012

Prof. Dr. H. Vogel (gesamt 8)

IX. International Conference Mechanisms of Catalytic Reactions, *Mechanistic studies on the selective oxydation of acrolein to acrylic acid on Mo/V/W-mixed oxide catalysts*, St. Petersburg, Russland, Oktober 2012

9. Veröffentlichungen nach Arbeitsgruppen

9.1. Anorganische Chemie

Prof. Dr. B. Albert

Begutachtete: 3

Frotscher, M., Senyshyn, A., Albert, B. (2012). *Neutron Diffraction at Metal Borides, Ru₂B₃ and Os₂B₃*. Z Anorg Allg Chem, **638**, 2078-2080.

Kayhan, M., Hildebrandt, E., Frotscher, M., Senyshyn, A., Hofmann, K., Alff, L., Albert, B. (2012). *Neutron diffraction and observation of superconductivity for tungsten borides, WB and W₂B₄*. Solid State Sci, **14**, 1656-1659.

Heiles, S., Hofmann, K., Johnston, R.L., Schäfer, R. (2012). *Nine-Atom Tin-Bismuth Clusters: Mimicking Excess Electrons by Element Substitutions*. Chem Plus Chem, **77**, 532-535.

Sonstige:

Albert, B. (2012). *Diffraction methods. Methods in Physical Chemistry*. Hsrg. Schäfer, R., Schmidt, P.C., Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 1. Auflage.

Albert, B. (2012). *Diffraction Methods – Structure Determination and Phase Analysis of Solids*. Bunsen-Magazin, **14**(3), 100-111.

Litterscheid, C., Knappschneider, A., Albert, B. (2012). *Single Crystal Structure of MnB₄*. Z Anorg Allg Chem, **638**, 1608.

Litterscheid, C., Albert, B. (2012). *Crystal Growth and Structures of Li_{3.5}RE^{III}_{1.5}(MoO₄)₄ (RE^{III}: Pr, Nd, Sm-Lu)*. Z Anorg Allg Chem, **638**, 1609.

Bruhn, G., Pfaff, G., Albert, B. (2012). *Bestimmung der Farbeigenschaften von Freudenbergit-Typ-Verbindungen*. Z Anorg Allg Chem, **638**, 1612.

Hord, R., Buckow, A., Pascua, G., Luetkens, H., Weber, K., Günther, M., Klauss, H-H., Alff, L., Albert, B. (2012). *Stabilisierung von La₂CuO₄ in der T-Modifikation durch Dotierung*. Z Anorg Allg Chem, **638**, 1613.

Gürsoy, M., Albert, B. (2012). *Seebeck-Koeffizienten von Borcarbid-Metallborid-Kompositen*. Z Anorg Allg Chem, **638**, 1613.

Kayhan, M., Hildebrandt, E., Alff, L., Albert, B. (2012). *Probing for Superconductivity in the Mo-B System*. Z Anorg Allg Chem, **638**, 1614.

Albert, B. (2012). *Neujahrsgruß der Präsidentin*. Nachrichten aus der Chemie, **60**, 3.

Albert, B. (2012). *Chemie fasziniert*. Berufsbilder in der Chemie, GDCh, 4-5.

Albert, B. (2012). *Was erwarten Sie von Ihrer GDCh-Präsidentin*. Chemie in unserer Zeit, **46**, 3.

Prof. i.R. Dr. H.-F. Klein

Begutachtete:

Klein, H.F., Kuhn, A., Kuhn, N., Laufer, S., Ströbele, M. (2012). *Zur Reaktion von Triphenylphosphan mit Thionylchlorid*. Z Anorg Allg Chem, **638**(11), 1784-1786.

Prof. Dr. H. Plenio

Begutachtete:

Thiel, V., Hendann, M., Wannowius, K.-J. (2012). *On the Mechanism of the Initiation Reaction in Grubbs-Hoveyda Complexes*. J Am Chem Soc, **134**, 1104-1114.

Schilz, M., Plenio, H. (2012). *A guide to Sonogashira cross coupling reactions – The influence of Substituents in aryl bromides, acetylenes and phosphines*. J Org Chem, **77**, 2798-2807.

Savka, R.D., Plenio, H. (2012). *A hexahydro-s-indacene based NHC ligand for olefin metathesis catalysts*. J Organomet Chem, **710**, 68-74.

Peeck, L.H., Savka, R.D., Plenio, H. (2012). *Fast olefin metathesis at low catalyst loading*. Chem Eur J, **17**, 12845 – 12853.

Prof. Dr. J.J. Schneider

Begutachtete:

Yilmazoglu, O., Popp, A., Paylidis, D., Schneider, J.J., Garth, D., Schüttler, F., Battenberg, G. (2012). *Vertically aligned multiwall carbon nanotubes for pressure, tactile and vibration sensing*. Nanotechnology, **23**, 085501.

Nick, C., Joshi, R., Schneider, J.J., Thielemann, C. (2012). *Low temperature substrate transfer technique for 3D vertically aligned carbon nanotubes “architectures”*. Int J Surf Sci Eng, **6**(3), 246.

Metin, Ö., Kayhan, E., Schneider, J.J., Özkar, S. (2012). *Palladium Nanoparticles Supported on Chemically Derived Graphene: An Efficient and Reusable Catalyst for the Dehydrogenation of Ammonia Borane*. Int J Hydrogen Energy, **37**, 8161-8169.

Schneider, J.J., Naumann, M. (2012). *Photocatalytic activity of pure and Gd-doped nanostructured ceria*. Z Anorg Allg Chem, **638**(10), 1562.

Dimesso, L., Förster, C., Jaegermann, W., Khanderi, J.P., Tempel, H., Popp, A., Engstler, J., Schneider, J.J., Sarapulova, A., Mikhailova, D., Schmitt, L.A., Oswald, S., Ehrenberg, H. (2012). *Developments in nanostructured LiMPO₄ (M = Fe, Co, Ni, Mn) – three dimensional carbon architecture composites*. Chem Soc Rev, **41**, 5068-5080.

Yilmazoglu, O., Considine, L., Joshi, R., Mimura, H., Paylidis, D., Hartnagel, H.L., Schneider, J.J., Eytukh, A., Semenenko, M., Litoychenko, V. (2012). *Monochromatic electron-emission from planar AlN/GaN multilayers with carbon nanotube gate electrode*. J Vac Sci Technol B, **30**, 042203.

Koch, S., Joshi, R.K., Noyong, M., Timper, J., Schneider, J.J., Simon, U. (2012). *Hierarchical Structures of Carbon Nanotubes and Arrays of Chromium-Capped Silicon Nanopillars: Formation and Electrical Properties*. Chem Eur J, **18**(37), 11614-11620.

Joshi, R.K., Schneider, J.J. (2012). *Assembly of one dimensional nanostructures into functional 2D and 3D architectures. Synthesis, arrangement and functionality*. Chem Soc Rev, **41**(15), 5285-5312.

Nayitski, A., Serbun, P., Müller, G., Joshi, R.K., Engstler, J., Schneider, J.J. (2012). *Height of CNT microstructures and contact interface to Si substrate as optimization factors for field emission cathodes*. Eur Phys J Appl Phys, **59**, 11302.

Kayhan, E., Prasad, R., Gurlo, A., Yilmazoglu, O., Paylidis, D., Engstler, J., Ionescu, E., Yoon, S., Weidenkaff, A., Schneider, J.J. (2012). *Synthesis, Characterization, Electronic and Gas Sensing Properties towards H₂ and CO of Transparent, Large Area, Low Layer Graphene*. Chem Eur J, **18**(47), 14996-15003.

Pashchanka, M., Schneider, J.J. (2012). *Synthesis and characterization of 1D CuInS₂ nanorod arrays*. Eur J Inorg Chem, **34**, 5621-5624.

Nick, C., Joshi, R.K., Schneider, J.J., Thielemann, C. (2012). *Three-Dimensional Carbon Nanotube Electrodes for Extracellular Recording of Cardiac Myocytes*. Biointerphases, **7**, 58.

Sonstige:

Schlaak, H.F., Greiner, F., Schneider, J.J. (2012). *Micro Nano Integration - Nano enhanced Microsystems*. Microsystems Technology in Germany, 32-33.

Schneider, J.J. (2012). *Biologie trifft Elektronik, Transistor mit Virus*, Stuttgarter Nachrichten.

9.2. Physikalische Chemie

Prof. Dr. G. Buntkowsky

Begutachtete:

Torres, V., Lopez, J.-M., Langer, U., Buntkowsky, G., Vieth, H.-M., Elguero, J., Limbach, H.-H. (2012). *Kinetics of Coupled Double Proton and Deuteron Transfer in Hydrogen-bonded Ribbons of crystalline Pyrazole-4-carboxylic Acid*. Z Phys Chem, **226**, 1125-1147.

Brenda, C., Ip, B., Shenderovich, I.G., Tolstoy, P.M., Frydel, J., Denisov, G.S., Buntkowsky, G., Limbach, H.-H. (2012). *NMR Studies of Solid Pentachlorophenol-4-Methylpyridine Complexes Exhibiting Strong OHN Hydrogen Bonds: Geometric H/D Isotope Effects and Hydrogen Bond Coupling Cause Isotopic Polymorphism*. *J Phys Chem A*, **116**, 11370.

De Sousa Amadeu, N., Grünberg, B., Frydel, J., Werner, M., Limbach, H.-H., Breitzke, H., Buntkowsky, G. (2012). *Melting of low molecular weight compounds in confinement observed by 2H-Solid State NMR: biphenyl, a case study*. *Z Phys Chem*, **226**, 1169-1185.

Grünberg, A., Breitzke, H., Buntkowsky, G. (2012). *Solid state NMR of immobilized catalysts and nanocatalysts Spectroscopic Properties of Inorganic and Organometallic Compounds*. *Techniques, Materials and Applications*, **43**, 289-323.

Haumann, M., Schönweiz, A., Breitzke, H., Buntkowsky, G., Werner, S., Szesni, N. (2012). *Solid state NMR investigations of supported ionic liquid phase (SILP) water-gas shift catalysts – ionic liquid film distribution vs. catalyst performance*. *Chem Eng Technol*, **35**(8), 1421 – 1426.

Trantzschel, T., Bernarding, J., Plautmann, M., Lego, D., Gutmann, T., Ratajczyk, T., Dillenberger, S., Buntkowsky, G., Bargon, J., Bommerich, U. (2012). *Parahydrogen induced polarization in face of keto-enol tautomerism: proof of concept with hyperpolarized ethanol*. *Phys Chem Chem Phys*, **14**, 5601-5604.

Ratajczyk, T., Gutmann, T., Dillenberger, S., Abdulhussaein, Frydel, J., Breitzke, H., Bommerich, U., Trantzschel, T., Bernading, J., Magusin, P., Buntkowsky, G. (2012). *Time Domain Para Hydrogen Induced Polarization*. *Solid State NMR*, **43-44**, 14-21.

Tietze, A., Tietze, D., Ohlenschläger, O., Leipold, E., Ullrich, F., Kühl, T., Mischo, A., Buntkowsky, G., Görlach, M., Heinemann, S.H., Imhof, D. (2012). *Structurally diverse μ -conotoxin P111A isomers block sodium channel Nav1.4*. *Angew Chem*, **124**, 4134-4137, *Angew Chem Int Edit*, **51**, 4058-4061.

Reutter, S., Privalov, A., Buntkowsky, G., Fujara, F. (2012). *Rotational Resonance in milli-tesla fields detected by Field Cycling NMR*. *Solid State NMR*, **41**, 74-77.

Tischler, M., Nasu, D., Empting, M., Schmelz, S., Heinz, D., Rottmann, Ph., Kolmar, H., Buntkowsky, G., Tietze, D., Avrutina, O. (2012). *Braces for the peptide backbone: Insights into structure-activity relationships of protease inhibitor mimics with locked amide conformations*. *Angew Chem*, **124**, 4134 – 4137, *Angew Chem Int Edit*, **124**, 3768-3772.

Ionescu, E., Papendorf, B., Kleebe, H.-J., Breitzke, H., Nonnenmacher, K., Buntkowsky, G., Riedel, R. (2012). *Phase separation of a hafnium alkoxide-modified polysilazane upon polymer-to-ceramic transformation- A case study*. *J Eur Ceram Soc*, **32**, 1873-1881.

Prof. i.R. Dr. W. Haase

Begutachtete:

Soto-Bustamante, E.A., Gonzalez-Henriquez, C.M., Haase, W., Vergara-Toloza, R.O. (2012). *Light sensitive antiferroelectric achiral co-polymers*. J Materials Chem, **22**, 3340-3347.

Osorio, R.E.H.M.B., Peralta, R.A., Bortoluzzi, A.J., Szpoganicz, B., Fischer, F.L., Terenzi, H., Mangrich, A.S., Ferreira, D.E.C., Rocha, W.R., Haase, W., Tomkowicz, Z., dos Anjos, A., Neves, A. (2012). *Synthesis, magnetostructural correlation and catalytic promiscuity of unsymmetric dinuclear Cu(II) complexes: models for catechol oxidases and hydrolases*. Inorg Chem, **51**, 1569-1589.

Arora, P., Podgornov, F., Kozlovsky, M., Kaur, A., Biradar, M., Haase, W. (2012). *Polarization holographic grating recording in a liquid crystalline azo dye copolymer with hidden helical superstructure*. Physica Scripta, **85**, 035405/1-3.

Mandal, P.K., Lapanik, A., Wipf, R., Stuehn, B., Haase, W. (2012). *Sub-hertz relaxation process in chiral smectic mixtures doped with silver nanoparticles*. Appl Phys Lett, **100**, 073112/1-3.

Rey, N.A., Neves, A., Bortoluzzi, A.J., Haase, W., Tomkowicz, Z. (2012). *Doubly phenoxo/hydroxo-bridged dicopper(II) complexes: individual contributions of the bridges to the antiferromagnetic coupling based on two related biomimetic models for catechol oxidases*. Dalton Trans, **41**, 7196-7200.

Tomkowicz, Z., Ostrovsky, S., Foro, S., Calvo-Perez, V., Haase, W. (2012). *Magneto-optical and structural investigations of five dimeric cobalt complexes mimicking metalloenzyme active sites*. Inorg Chem, **51**, 6046-6055.

Piovezan, C., Silva, J., Neves, A., Bortoluzzi, A., Haase, W., Tomkowicz, Z., Castello, E., Hough, T., Rossi, L. (2012). *Design of a dinuclear nickel(II) bioinspired hydrolase to bind covalently to silica surfaces: synthesis, magnetism and reactivity studies*. Inorg Chem, **51**, 6104-6115.

Lapanik, A., Rudzki, A., Kinkead, B., Qi, H., Hegmann, T., Haase, W. (2012). *Electrooptical and dielectric properties of alkylthiol-capped gold nanoparticle-ferroelectric liquid crystal nanocomposites: Influence of chain length and tethered liquid crystal functional group*. Soft Matt, **8**, 8722-8728.

Soto-Bustamante, E.A., Vergara-Toloza, R., Haase, W. (2012). *Antiferroelectric domains in liquid crystalline methacrylic polymers*. Chem Phys Lett, **545**, 29-34.

Soto-Bustamante, E.A., Vergara-Toloza, R., Haase, W. (2012). *Design of highly polarized chiral mesogenic composites*. J Mat Chem, **34**, 17753-17758.

Haldar, S., Dey, K.C., Sinha, D., Mandal, P.K., Haase, W., Kula, P. (2012). *X-ray diffraction and dielectric spectroscopy studies on a partially fluorinated ferroelectric liquid crystal compound from the family of terphenyl esters*. Liq Cryst, **39**, 1196-1203.

Lapanik, V., Bezborodov, V., Sasnouski, G., Haase, W. (2012). *Unique chiral compounds as part of mixtures with optimized properties for different types of FLCs*. Phase Trans, **85**, 900-909.

Podgornov, F.V., Haase, W., Yoshino, K. (2012). *Chiral liquid Crystal/TiO₂ nanocomposites: Enhancement of optical and electrooptical properties*. J Soc Elect Mat Eng, **20**, 35/173-42/180.

Tomkowicz, Z., Rams, M., Balanda, M., Foro, S., Nojiri, H., Krupskaja, Y., Kataev, V., Büchner, B., Nayek, S.K., Yakhmi, J.V., Haase, W. (2012). *Slow Magnetic Relaxations in Manganese(III) Tetra(metafluorophenyl)porphyrin-tetracyanoethenide. Comparison with the Related Single Chain Magnet ortho Compound*. Inorg Chem, **51**, 9983-9994.

Sonstige:

Haase, W. (2012), *Dielectric and Electrooptic Investigations of Liquid Crystals and Liquid Crystalline Nanocolloids between Subhertz and 100 Gigahertz Region*, 24th International Conference on Liquid Crystals.

Prof. Dr. C. Hess

Begutachtete:

Thielemann, J.P., Hess, C. (2012). *Structure of silica-supported molybdenum oxide studied by in situ spectroscopy under reactive and non-reactive conditions*. J Catal, **288**, 124–126.

Nottbohm, C.T., Hess, C. (2012). *Investigation of ceria by combined Raman, UV-Vis and X-ray photoelectron spectroscopy*. Catal Commun, **22**, 39–42.

Sonstige:

Sänze, S., Hess, C. (2012). *Operando spectroscopic study of the EtOH gas sensing mechanism of In₂O₃*. IMCS 2012 – The 14th International Meeting on Chemical Sensors, 613-615.

Prof. Dr. F. Müller-Plathe

Begutachtete:

Karimi-Varzaneh, H.A., Müller-Plathe, F., Kirchner, B., Vrabec, J. (2012). *Coarse -grained modeling for macromolecular chemistry. Multiscale Molecular Methods in Applied Chemistry*. Curr Chem, **307**, 295-321.

Algaer, E.A., Müller-Plathe, F. (2012). *Calculation of the Thermal Conductivity of Molecular Liquids Polymers, and Carbon Nanotubes*. Soft Materials, **10**, 42–80.

Ndoro, T.V.M., Müller-Plathe, F., Böhm, M.C. (2012). *Interface and interphase dynamics near grafted and ungrafted silica nanoparticles in a polystyrene matrix*. Macromolecules, **45**, 171–179.

Ghanbari, A., Ndoro, T.V.M., Leroy, F., Rahimi, M., Böhm, M.C., Müller-Plathe, F. (2012). *Interphase Structure in a Silica-Polystyrene Nanocomposite: A Coarse-Grained Molecular Dynamics Study*. Macromolecules, **45**, 572–584.

-
- Pfaller, S., Possart, G., Steinmann, P., Rahimi, M., Müller-Plathe, F., Böhm, M.C. (2012). *A comparison of staggered solution schemes for coupled particle-continuum systems modeled with the Arlequin method*. Chem Phys Chem, **13**, 1127–1151.
- Farah, K., Müller-Plathe, F., Böhm, M.C. (2012). *Classical Reactive Molecular Dynamics Implementations: State of the Art*. Chem Phys Chem, **13**, 1127–1151.
- Butler, S.N., Müller-Plathe, F. (2012). *A Molecular Dynamics Study of Viscosity in Ionic Liquids Directed by Quantitative Structure-Property Relationships*. Chem Phys Chem, **13**, 1791–1801.
- Leroy, F., Müller-Plathe, F. (2012). *Can Continuum Thermodynamics Characterize Wenzel Wetting States of Water at the Nanometer Scale?* J Chem Theor Sim, **8**, 3724–3732.
- van der Vegt, N.F.A., Müller-Plathe, F., Carbone, P. (2012). *How good are coarse-grained polymer models? A comparison for atactic polystyrene*. Chem Phys Chem, **13**, 3428–3439.
- Rahimi, M., Iriarte-Carretero, I., Ghanbari, A., Böhm, M.C., Müller-Plathe, F. (2012). *Mechanical behavior and interphase structure in a silica-polystyrene nanocomposite under uniaxial deformation*. Nanotechnology, **23**, 305702.
- Riccardi, E., Böhm, M.C., Müller-Plathe, F. (2012). *Molecular dynamics method to locally resolve Poisson's ratio: Mechanical description of the solid-soft-matter interphase*. Phys Rev E, **86**, 036704.
- Balasubramanian, G., Schulte, J., Müller-Plathe, F., Böhm, M.C. (2012). *Structural and thermochemical properties of photoresponsive spiropyran and merocyanine pair: Basis set and solvent dependence in density functional predictions*. Chem Phys Lett, **554**, 60–66.
- Farah, K., Langeloth, M., Böhm, M.C., Müller-Plathe, F. (2012). *Surface-Induced Interphases During Curing Processes Between Bi- and Pentafunctional Components: Reactive Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations*. J Adhes, **88**, 903–923.
- Riccardi, E., Wang, J.-Ch., Liapis, A.I., Separ, J. (2012). *Molecular Modeling of Polymeric Adsorbent Media: The Effects of Counter-Ions on Ligand Immobilization and Pore Structure*. Sci, **35**, 3073-83.
- Mammen, L., Deng, X., Untch, M., Vijayshankar, D., Papadopoulos, P., Berger, R., Riccardi, E., Leroy, F., Vollmer, D. (2012). *Effect of Nanoroughness on Highly Hydrophobic and Superhydrophobic Coatings*. Langmuir, **28**, 15005–15014.
- Alaghemandi, M., Gharib-Zahedi, M.R., Spohr, E., Böhm, M.C. (2012). *Thermal conductivity of polyamide-6,6 in the vicinity of charged and uncharged graphene layers: A molecular dynamics analysis*. J Phys Chem C, **116**, 14115–14122.
- Voyiatzis, E. (2012). *Mechanical properties and elastic constants of atomistic systems through the stress - fluctuation formalism*. Phys Commun, **184**, 27–33.

Prof. Dr. R. Schäfer

Begutachtete:

Götz, D.A., Heiles, S., Schäfer, R. (2012). *Polarizabilities of Si_N ($N=8-75$) clusters from molecular beam electric deflection experiments*. Eur Phys J D, **66**, 293.

Heiles, S., Johnston, R.L., Schäfer, R. (2012). *Bismuth-Doped Tin Clusters: Experimental and Theoretical Studies of Neutral Zintl Analogues*. J Phys Chem A, **116**, 7756–7764.

Heiles, S., Hofmann, K., Johnston, R.L., Schäfer, R. (2012). *Nine-Atom Tin-Bismuth Clusters: Mimicking Excess Electrons by Element Substitution*. Chem Plus Chem, **77**, 532–535.

Götz, D.A., Heiles, S., Johnston, R.L., Schäfer, R. (2012). *Note: Gas phase structures of bare Si_8 and Si_{11} clusters from molecular beam electric deflection experiments*. J Chem Phys, **138**, 186101.

Kast, S.M., Schäfer, S., Schäfer, R. (2012). *Thermally induced polarizabilities and dipole moments of small tin clusters*. J Chem Phys, **136**, 134320.

Heiles, S., Logsdail, A.J., Schäfer, R., Johnston, R.L. (2012). *Dopant-induced 2D–3D transition in small Au-containing clusters: DFT-global optimisation of 8-atom Au–Ag nanoalloys*. Nanoscale, **4**, 1109–1115.

Sonstige:

Berger, R., Gutmann, J., Schäfer, R. (2012). *Rastersondenmethoden für Polymere und Biomoleküle*. Nachrichten aus der Chemie, **60**, 754–757.

Schäfer, R., Schmidt, P.C. (2012). *Methods in Physical Chemistry*. 2 Volumes, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 1. Auflage.

Prof. Dr. N.F.A. van der Vegt

Begutachtete:

Brini, E., van der Vegt, N.F.A. (2012). *Chemically transferable coarse-grained potentials from conditional reversible work calculations*. J Chem Phys, **137**, 154113.

Mukherji, D., van der Vegt, N.F.A., Kremer, K. (2012). *Preferential solvation of triglycine in aqueous urea: An open boundary simulation approach*. J Chem Theory Comput, **8**, 3536.

Hajari, T., Ganguly, P., van der Vegt, N.F.A. (2012). *Enthalpy-entropy of cation association with the acetate anion in water*. J Chem Theory Comput, **8**, 3804.

Johnston, K., Herbers, C.R., van der Vegt, N.F.A. (2012). *Development of classical molecule-surface interaction potentials based on density functional theory calculations: investigation of force field representability*. J Phys Chem C, **116**, 19781–19788.

Brini, E., Herbers, C.R., Deichmann, G., van der Vegt, N.F.A. (2012). *Thermodynamic transferability of coarse-grained potentials for polymer-additive systems*. Phys Chem Chem Phys, **14**, 11896-11903.

Ganguly, P., Mukherji, D., Junghans, C., van der Vegt, N.F.A. (2012). *Kirkwood-Buff coarse-grained force fields for aqueous solutions*. J Chem Theory Comput, **8**, 1802-1807.

Mukherji, D., van der Vegt, N.F.A., Kremer, K., Delle Site, L. (2012). *Kirkwood-Buff analysis of liquid mixtures in an open boundary simulation*. J Chem Theory Comput, **8**, 375-379.

Karimi-Varzaneh, H.A., van der Vegt, N.F.A., Müller-Plathe, F., Carbone, P. (2012). *How good are coarse-grained polymer models? A comparison for atactic polystyrene*. Chem Phys Chem, **13**, 3428.

Li, C., Shen, J.-W., Peter, C., van der Vegt, N.F.A. (2012). *A chemically accurate implicit-solvent coarse-grained model for polystyrenesulfonate solutions*. Macromolecules, **45**, 2551-2561.

Marcon, V., Fritz, D., van der Vegt, N.F.A. (2012). *Hierarchical modeling of polystyrene surfaces*. Soft Matter, **8**, 5585-5594.

Delle Site, L., Holm, C., van der Vegt, N.F.A. (2012). *Multiscale approaches and perspectives to modeling aqueous electrolytes and polyelectrolytes*. Top Curr Chem, **307**, 251-294.

9.3. Technische Chemie

Prof. Dr. P. Claus

Begutachtete:

Schwab, F., Lucas, M., Claus, P. (2011). *Ruthenium-katalysierte Selektivhydrierung von Benzol zu Cyclohexen in Gegenwart einer ionischen Flüssigkeit*. Ang Chem, **123**(44), 10637-10640.

Hofmann, H.J., Brandner, A., Claus, P. (2012). *Direct Synthesis of Dimethyl Carbonate by Carboxylation of Methanol on Ceria-Based Mixed Oxides*. Chem Eng Tech, **35**(12), 2140-2146.

Pachulski, A., Schoedel, R., Claus, P. (2012). *Kinetics and reactor modeling of a Pd-Ag/Al₂O₃ catalyst during selective hydrogenation of ethyne*. Appl Catal A, **445**, 107-120.

Woerz, N., Claus, P., Lang, S., Hampe, M.J. (2012). *Thermodynamics and transport properties of citral*. AIChE J, **58**(8), 2557-2562.

Hon. Prof. Dr. K. Griesar

Sonstige:

Griesar, K. (2012). *Innovation passiert nicht einfach*. CHEManager, **12**, 13-14.

Griesar, K. (2012). *Mehrdimensional-Innovationsmanagement in der chemischen Industrie*. CITplus, 9.

Griesar, K. (2012). *Studiengang Wirtschaftschemie – etabliert und erfolgreich*. CHEManager, 8, 21-22.

Prof. em. Dr. G. Luft

Begutachtete:

Rau, A., Wieczorek, Th., Dornik, H., Luft, G. (2013). *Ansa-Zirconocenes with Bridge-tethered Donors: Synthesis and Application as Catalysts in Solution Polymerization of Ethylene*. Chem Eng Technol, 36 (2), 339-346.

Prof. Dr. H. Vogel

Begutachtete:

Scheuer, A., Hauptmann, W., Drochner, A., Gieshoff, J., Vogel, H., Votsmeier, M. (2012). *Dual layer automotive ammonia oxidation catalyts: Experiments and computer simulation*. Appl Cat B: Enviromental, 111-112, 445-455.

Jekewitz, T., Blickhan, N., Endres, S., Drochner, A., Vogel, H. (2012). *The influence of water on the selective oxidation of acrolein to acrylic acid on Mo/V/W-mixed oxides*. Catal Commun, 20, 25-28.

Sarlea, M., Kohl, S., Blickhan, N., Vogel, H. (2012). *Homogeneous Catalysis of Valeronitrile Hydrolysis under Supercritical Conditions*. Chem Sus Chem, 5, 200-2005.

Scheuer, A., Drochner, A., Gieshoff, J., Vogel, H., Votsmeier, M. (2012). *Runtime efficient simulation of monolith catalyts with a dual-layer washcoat*. Catal Today, 188, 70-79.

Sonstige:

Drochner, A., Vogel, H. (2012). *Diffuse Reflectance Infrared Fourier Transform Spectroscopy (DRIFTS): an In situ Method for the Study of the Nature and Dynamics of Surface Intermediates*. Methods in Physical Chemistry, Vol. 2, Edited by R. Schäfer and P. C. Schmidt, Wiley-VCH, Weinheim.

Dürr, N., Kantchev, K., Drochner, A., Vogel, H. (2012). *TP-Reaktionsstudie zum Einfluss von Wasser auf die Partialoxidation von Methacrolein an HPA-Katalysatoren*. Chem Ing Techn, 8, 1234.

Liebeck, M., Pfeifer, C., Drochner, A., Vogel, H. (2012). *Hydrothermale Carbonisierung – Rückschlüsse von Modellkomponenten auf reale Biomassen*. Chem Ing Techn, 8, 1311-1312.

Vogel, H. (2012). *Akku voll – Von Solarenergie über Solarwasserstoff zu Solar-Fuels*. Eta Green, 4, 25-26.

Vogel, H. (2012). *Moderne Synergien – Entwicklung, Planung und Bau chemischer Produktionsanlagen*. Chemie & more, **3**, 20-23.

9.4. Makromolekulare Chemie

Prof. Dr. M. Biesalski

Begutachtete:

Böhm, A., Biesalski, M. (2012). *Photo-attaching functional polymers to cellulose fibers for the design of chemically modified paper*. Cellulose, **20**, 467-483.

Sonstige:

Biesalski, M., Gattermayer, M., Böhm, A., Schabel, S., Bonarcurso, E. (2012). *Designing microfabricated paper devices through tailored polymer attachment*. Proceedings of the ICPPB, Nanjing 2012, China.

Biesalski, M. (2012). Abstracts of the Papers of the American Chemical Society, 243, Spring Meeting, San Diego, Cellulose Division.

Loyal, F., Biesalski, M. (2012). Abstracts of the Papers of the American Chemical Society, 243, Spring Meeting, San Diego, Cellulose Division.

Schenderlein, H., Biesalski, M. (2012). Abstracts of the Papers of the American Chemical Society, 243, Spring Meeting, San Diego, Polymer Division.

Jun. Prof. Dr. A. Brunsen

Begutachtete:

Brunsen, A., Ritz, U., Mateescu, A., Höfer, I., Frank, P., Menges, B., Hofmann, A., Rommens, P.M., Knoll, W., Jonas, U. (2012). *Photocrosslinkable Dextran Hydrogel Films as Substrates for Osteoblast and Endothelial Cell Growth*. J Mater Chem, **22**, 19590.

Brunsen, A., Díaz, C., Pietrasanta, L., Yameen, B., Ceolín, M., Soler-Illia, G.J.A.A., Azzaroni, O. (2012). *Proton and calcium-gated ionic mesochannels: phosphate-bearing polymer brushes hosted in mesoporous thin films as biomimetic interfacial architectures*. Langmuir, **28**(7), 3583.

Brunsen, A., Cui, J., Ceolín, M., del Campo, A., Soler-Illia, G.J.A.A., Azzaroni, O. (2012). *Light-activated gating and permselectivity in interfacial architectures combining “caged” polymer brushes and mesoporous thin films*. Chem Commun, **48**, 1422.

Brunsen, A., Jonas, U., Utech, S., Maskos, M., Knoll, W. (2012). *Magnetic Composite Thin Films of Fe_xO_y Nanoparticles and Photocrosslinked Dextran Hydrogen*. J Magn Magn Mater, **324**(8), 1488.

Prof. Dr. M. Rehahn

Begutachtete:

Mazurowski, M., Gallei, M., Rehahn, M. (2012). *Convenient Quantification of Accessible Surface-Attached ATRP Initiators and RAFT Chain Transfer Agents on Cross-Linked Polystyrene Nanoparticles*. ACS Macro Lett, **1**, 1362–1366.

Staff, R.H., Gallei, M., Mazurowski, M., Rehahn, M., Berger, R., Landfester, K., Crespy, D. (2012). *Patchy Nanocapsules of Poly(vinylferrocene)-Based Block Copolymers for Redox-Responsive Release*. ACS Nano, **6**(10), 9042–9049.

Tonhauser, C., Mazurowski, M., Rehahn, M., Gallei, M., Frey, H. (2012). *Water-Soluble Poly(vinylferrocene)-b-Poly(ethylene oxide) Diblock and Miktoarm Star Polymers*. Macromolecules, **45**, 3409.

Mazurowski, M., Gallei, M., Li, J., Didzoleit, D., Stühn, B., Rehahn, M. (2012). *Redox-Responsive Polymer Brushes Grafted from Polystyrene Nanoparticles by Means of Surface-Initiated Atom Transfer Radical Polymerization*. Macromolecules, **45**, 8970-8981.

Staff, R.H., Gallei, M., Mazurowski, M., Rehahn, M., Landfester, K., Crespy, D. (2012). *New Functional Colloidal Morphologies from Block Copolymer Assembly in Droplets*. Macromol Chem Phys, **213**, F80-81.

Sonstige:

Vilbrandt, N., Rehahn, M. (2012). *Scope and limits of the Gilch synthesis of poly(p-phenylene vinylenes)*. Polymer Preprints, **53**(1), 89-90.

Schlüter, D. A., Iawker, C., Sakamoto, J., Chapter 29: *Poly(para-Phenylene Vinylene)s* Vilbrandt, N., Nickel, S., Immel, S., Rehahn M., Stegmaier K., Melzer C., v. Seggern H., *Synthesis of Polymers: New Structures and Methods*. Wiley-VCH, 1. Auflage (2012), 901-922.

Gallei, M., Mazurowski, M. Rehahn, M. (2012). *Redox-Responsive Ferrocene-Containing Polymers by Means of Living and Controlled Polymerization*. Smart Polymers Book of Abstracts.

Schäfer, C., Gallei, M., Hellmann, G.P., Rehahn, M. (2012). *Light and Mechanical Stress Responsive Synthetic Opals*. Smart Polymers Book of Abstract.

9.5. Organische Chemie

Prof. Dr. R. Berger

Begutachtete:

Isaev, T.A., Berger, R. (2012). *Electron correlation and nuclear charge dependence of parity-violating properties in open-shell diatomic molecules*. Phys Rev A, **86**, 062515.

Boländer, A., Kieser, D., Voss, C., Bauer, S., Schön, C., Burgold, S., Bittner, T., Hölzer, J., Heyny-von Haußen, R., Mall, G., Goetschy, V., Czech, C., Knust, H., Berger, R., Herms, J., Hilger, I., Schmidt, B. (2012). *Bis(arylvinyl)pyrazines, -pyrimidines and -pyridazines as Imaging Agents for Tau Fibrils and Amyloid Plaques in Alzheimer's Disease Models*. J Med Chem, **55**, 9170-9180.

Berger, R., Courtieu, J., Gil, R.R., Griesinger, C., Köck, M., Lesot, P., Luy, B., Merlet, D., Navarro-Vazquez, A., Reggelin, M., Reinscheid, U.M., Thiele, C. M., Zweckstetter, M. (2012). *Is Enantiomer Assignment Possible by NMR Spectroscopy Using Residual Dipolar Couplings from Chiral Nonracemic Alignment Media? - A Critical Assessment*. Angew Chem Int Ed, **51**, 8388-8391. Angew Chem, **124**, 8512-8515.

Trinter, F., Schmidt, L.Ph.H., Jahnke, T., Schöffler, M.S., Jagutzki, O., Czasch, A., Lower, J., Isaev, T.A., Berger, R., Landers, A.L., Weber, Th., Dörner, R., Schmidt-Böcking, H. (2012). *Multi fragment vector correlation imaging - A search for hidden dynamical symmetries in many-particle molecular fragmentation processes*. Mol Phys, **110**, 1863-1872.

Dommert, F., Wendler, K., Berger, R., Delle Site, L., Holm, C. (2012). *Force fields for studying structure and dynamics of ionic liquids - a critical review of recent developments*. Chem Phys Chem, **13**, 1625-1637.

Elgavi, H., Krekeler, C., Berger, R., Avnir, D. (2012). *Chirality in Copper Nanoalloy Clusters*. J Phys Chem C, **116**, 330-335.

Wendler, K., Dommert, F., Zhao, Y.-Y., Berger, R., Holm, C., Delle Site, L. (2012). *Ionic liquids studied across different scales: a computational perspective*. Faraday Discuss, **154**, 111-132.

Köhn, A., Diezemann, G., Berger, R., Basché, T. (2012). *Kommentar zu: H. Mustroph, S. Ernst "Das Franck-Condon-Prinzip"*. Chiu, **46**, 117-118.

Sonstige:

Huh, J., Berger, R. (2012). *Coherent state-based generating function approach for Franck-Condon transitions and beyond*. J Phys Conf Ser, **380**, 012019.

Isaev, T.A., Nahrwold, S., Xiao, Y., Berger, R. (2012). *Parity violating effects in diatomic molecules and some group-theoretical considerations on chirality in polyatomic molecules*. AIP Conf Proc, **1504**, 461-464.

Andrä, J., Berger, R., Jahn, U., Kaiser, M., Kottke, T., Müller-Buschbaum, K., Schnepf, A., von Wangelin, A.J. (2012). Notizen aus der Chemie. Nachr Chem, **60**, 106-108.

Prof. Dr. W.-D. Fessner

Begutachtete:

Fessner, W.-D., Heyl, D., Rale, M. (2012). *Multi-enzymatic cascade synthesis of D-fructose 6-phosphate and deoxy analogs as substrates for high-throughput aldolase screening*. Catal Sci Technol, **2**, 1596–1601.

Yi, D., Devamani, T., Abdoul Zabar, J., Charmantray, F., Helaine, V., Hecquet, L., Fessner, W.-D. (2012). *A pH-Based High-Throughput Assay for Transketolase — Fingerprinting of Substrate Tolerance and Quantitative Kinetics*. Chem Bio Chem, **13**, 2290–2300.

Sonstige:

Fessner, W.-D. (2012). *Aldol Reactions in Enzyme Catalysis in Organic Synthesis* (Eds. Drauz, K.; Gröger, H.; May, O.), 3rd edition. Wiley-VCH, Weinheim, Vol. 2, Chapter 21, pp 857-917.

Fessner, W.-D. (2012). *Horst Prinzbach (1931–2012) – Obituary*. Angew Chem, **124**, 12102-12103, Angew Chem Int Ed, **51**, 11936-11937.

PD Dr. R. Meusinger

Begutachtete:

Kraïkivskii, P.B., Saraev, V.V., Meusinger, R., Bocharova, V.V., Ushakov, I.A., Petrovskii, S.K. (2012). *2D-NMR and EPR study of the activation of p-allyl group within the coordination sphere of the imine-amide complex of nickel (II) by the coordination of PMe₃*. J Org Chem, **715**, 43-47.

Sonstige:

Meusinger, R. (2012). *Solution to a “little western flower” challenge*. Anal Bioanal Chem, **402**, 2231–2232.

Meusinger, R. (2012). *Strukturaufklärung mit Hilfe der NMR-Spektroskopie*. GIT Labor-Fachzeitschrift, **5**, 338-341.

Meusinger, R. (2012). *The Olympic Games challenge*. Anal Bioanal Chem, **404**, 2113–2116.

Prof. Dr. M. Reggelin

Reggelin, M., Mehler, C., Kaiser, J.-P. (2012). *Synthesis of Bis(4-methylphenylsulfonimidoyl)methane - The First 'Free' Geminal Bis(sulfoximine)*, *Synlett*, **23**, 1095 - 1098.

Khlebnikov, A.F., Kozhushkov, S. I., Yufit, H., Schill, D.S., Reggelin, M., Spohr, V., deMeijere, A. (2012). *A Novel Type of Chiral Triangulane-Based Diphosphane Ligands for Transition Metals*, *Eur J Org Chem*, **8**, 1530 - 1545.

Berger, R., Courtieu, J., Gil, R. R., Griesinger, C., Köck, M., Lesot, P., Luy, B., Merlet, D., Navarro-Vazquez, A., Reggelin, M., Reinscheid, U.M., Thiele, C.M., Zweckstetter, M. (2012). *Is Enantiomer Assignment Possible by NMR Spectroscopy Using Residual Dipolar Couplings from Chiral Nonracemic Alignment Media? - A Critical Assessment*. *Angew Chem Int Ed*, **51**, 8388-8391. *Angew Chem*, **124**, 8512-8515

Meyer, N.-C., Krupp, A., Schmidts, V., Thiele, C.M., Reggelin, M. (2012). *Polyacetylenes as Enantiodifferentiating Alignment Media*. *Angew Chem*, **124**, 8459–8463, *Angew Chem Int Ed*, **51**, 8334 - 8338.

Weise, C.F., Immel, S., Richter, F., Schneider, C. (2012). *The Oxy-Cope Rearrangement of Aldol Products. A Combined Experimental and Theoretical Study*. *Eur J Org Chem*, **8**, 1520 - 1529.

Krupp, A., Reggelin, M. (2012). *Phenylalanine-based polyarylacetylenes as enantiomer-differentiating alignment media*. *Magn Reson Chem*, **50**, 545 - 552.

Prof. Dr. B. Schmidt

Begutachtete:

Zall, A., Bensinger, D., Schmidt, B. (2012). *Oxidative homologation of aldehydes to -ketoaldehydes by iodoform, IBX and dimethylsulfoxide*. *Eur J Org Chem*, **7**, 1439 - 1447.

Lo Monte, F., Kramer, T., Gu, J., Anumala, U., Marinelli, L., La Pietra, V., Novellino, E., Franco, B., Demedts, D., Van Leuven, F., Fuertes, A., Dominguez, J., Plotkin, B., Eldar-Finkelman, H., Schmidt, B. (2012). *Identification of Glycogen Synthase Kinase-3 Inhibitors with a Selective Sting for Glycogen Synthase Kinase-3*. *J Med Chem*, **55**(9), 4407 – 4424.

Lo Monte, F., Kramer, T., Gu, J., Brodrecht, M., Pilakowski, J., Fuertes, A., Dominguez, J.M., Plotkin, B., Eldar-Finkelman, H., Schmidt, B. (2012). *Structure-based optimization of oxadiazole-based GSK-3 inhibitors*. *Eur J Med Chem*, **61**, 26-40.

Boländer, A., Kieser, D., Voss, C., Bauer, S., Schön, C., Burgold, S., Bittner, T., Hölzer, J., Heyny-von Haußen, R., Mall, G., Goetschy, V., Czech, C., Knust, H., Berger, R., Herms, J., Hilger, I., Schmidt, B. (2012). *Bis(arylvinyl)pyrazines, -pyrimidines and -pyridazines as Imaging Agents for Tau Fibrils and β -Amyloid Plaques in Alzheimer's Disease Models*. *J Med Chem*, **55**(21), 9170-9180.

Bittner, T., Burgold, S., Dorostkar, M.M., Fuhrmann, M., Wegenast-Braun, B.M., Schmidt, B., Kretschmar, Herms, J. (2012). *Amyloid plaque formation precedes dendritic spine loss*. Acta Neuropathologica, **124**(6), 797-808.

Gu, J., Anumala, U.R., Lo Monte, F., Kramer; T., Heyny-von Haußen, R., Hölzer; J., Goetschy-Meyer, V., Mall, G., Hilger, I., Czech, C., Schmidt, B. (2012). *2-Styrylindolium based fluorescent probes visualize neurofibrillary tangles in Alzheimer's disease*. Bioorg Med Chem Lett, **22**(24), 7667-7671.

Schön, C., Hoffmann, N.A., Ochs, S.M., Burgold, S., Filser, S., Steinbach, S., Seeliger, M.W., Arzberger, T., Goedert, M., Kretschmar, H.A., Schmidt, B., Herms, J. (2012). *Long-Term In Vivo Imaging of Fibrillar Tau in the Retina of P301S Transgenic Mice*. PLoS ONE, **7**(12), e53547.

Cooper, A.M., Hobson, P.S., Jutton, M.R., Kao, M.W., Thomaszewski, B., Schmidt, B., Fear, D.J., Beavil, A.J., McDonnell, J.M., Sutton, B.J., Gould, H.J. (2012). *Soluble CD23 Controls IgE Synthesis and Homeostasis in Human B Cells*. J Immun, **188**(7), 3199-3207.

Lo Sardo, V., Zuccato, C., Gaudenzi, G., Vitali, B., Ramos, C., Tartari, M., Myre, M.A., Walker, J.A., Postocchi, A., Conti, L., Valenza, M., Drung, B., Schmidt, B., Gusella, J., Zeitlin, S., Cotelli, F., Cattaneo, E. (2012). *An evolutionary recent neuroepithelial cell adhesion function of huntingtin implicates ADAM10-Ncadherin*. Nature Neuroscience, **15**(5), 713-721.

Xiao, Q., Zhang, F., Lin, L., Fang, C., Wen, G., Tsai, T.-N., Pu, X., Sims, D., Zhang, Z., Yin, X., Thomaszewski, B., Schmidt, B., Mayr, M., Suzuki, K., Xu, Q., Ye, S. (2012). *A Functional Role of Matrix Metalloproteinase-8 in Stem/Progenitor Cell Migration and Their Recruitment into Atherosclerotic Lesions*. Circulation Research, **112**, 35.

Kramer, T., Lo Monte, F., Göring, S., Okala Amombo, G.M., Schmidt, B. (2012). *Small molecule kinase inhibitors for LRRK2 and their application to Parkinson's disease models*. ACS Chemical Neuroscience, **3**(3), 151-160.

Kramer, T., Schmidt, B., Lo Monte, F. (2012). *International Journal of Alzheimer's Disease, Small-molecule inhibitors of GSK-3 - Structural insights and their application to Alzheimer's disease models*. Int J Alzheimers Dis, 381029.

Prof. Dr. C.M. Thiele

Begutachtete:

Thiele, C.M., Bermel, W. (2012). *Speeding up the measurement of one-bond scalar (1J) and residual dipolar couplings (1D) by using non-uniform sampling (NUS)*. J Magn Reson, **216**, 134-143.

Berger, R., Courtieu, J., Gil, R.R., Griesinger, C., Köck, M., Lesot, P., Luy, B., Merlet, D., Navarro-Vázquez, A., Reggelin, M., Reinscheid, U. M., Thiele, C.M., Zweckstetter, M. (2012). *Is Enantiomer Assignment Possible by NMR Spectroscopy Using Residual Dipolar Couplings from Chiral Nonracemic Alignment Media? – A Critical Assessment*. Angew Chem, **124**, 8512–8515, Angew Chem Int Ed, **51**, 8388–8391.

Meyer, N.-C., Krupp, A., Schmidts, V., Thiele, C.M., Reggelin, M. (2012). *Polyacetylenes as Enantiodifferentiating Alignment Media*. *Angew Chem*, 124, 8459–8463, *Angew Chem Int Ed*, **51**, 8334–8338.

Giraudeau, P., Montag, T., Charrier, B., Thiele, C.M. (2012). *Fast access to residual dipolar couplings by single-scan 2D NMR in oriented media*. *Magn Reson Chem*, **50**, 53–57.

Sonstige:

Böttcher, B., Thiele, C.M. (2012). *Determining the Stereochemistry of Molecules from Residual Dipolar Couplings (RDCs)*. *Encyclopedia of Magnetic Resonance*, (published by R.K. Harris, R.E. Wasylishen), John Wiley, Chichester.

Weinig, H.-G., Thiele, C.M. (2012). *Chinesisch-Deutsches Symposium Frontiers of Chemistry*. *Nachrichten aus der Chemie*, **60**(12), 1234-1235.

9.6. Biochemie

Prof. Dr. N.A. Dencher

Begutachtete:

Buchsteiner, A., Hauß, T., Dencher, N.A. (2012). *Influence of amyloid- β peptides with different lengths and amino acid sequences on the lateral diffusion of lipids in model membranes*. *Soft Matter*, **8**(2), 424-429.

Prof. Dr. H. Kolmar

Begutachtete:

Hofmeyer, T., Schmelz, S., Degiacomi, M.T., Dal Peraro, M., Daneschdar, M., Scrima, A., van den Heuvel, J., Heinz, D.W., Kolmar, H. (2012). *Arranged sevenfold: structural insights into the C-terminal oligomerization domain of human C4b-binding protein*. *J Mol Biol*, **425**(8), 1302-17.

Hörner, S., Fabritz, S., Herce, H.D., Avrutina, O., Dietz, C., Stark, R.W., Cardoso, C., Kolmar, H. (2012). *Cube-octameric silsesquioxane-mediated cargo peptide delivery into living cancer cells*. *Org Biomol Chem*, **11**(14), 2258-65.

Reinwarth, M., Glotzbach, B., Tomaszowski, M., Fabritz, S., Avrutina, O., Kolmar, H. (2012). *Oxidative Folding of Peptides with Cystine-Knot Architectures: Kinetic Studies and Optimization of Folding Conditions*. *Chembiochem*, **14**(1), 137-46.

Capito, F., Skudas, R., Stanislawski, B., Kolmar, H. (2012). *Matrix effects during monitoring of antibody and host cell proteins using attenuated total reflection spectroscopy*. *Biotechnol Progress*, **29**, 265-274.

Forster, S., Kolmar, H., Altmaier, S. (2012). *Synthesis and characterization of new generation open tubular silica capillaries for liquid chromatography*. J Chromatogr A, **1265**, 88-94.

Avrutina, O., Fittler, H., Glotzbach, B., Kolmar, H., Empting, M. (2012). *Between two worlds: a comparative study on in vitro and in silico inhibition of trypsin and matrilysin by redox-stable SFTI-1 variants at near physiological pH*. Org Biomol Chem, **10**(38), 7753-62.

Capito, F., Skudas, R., Kolmar, H., Stanislawski, B. (2012). *Host cell protein quantification by fourier transform mid infrared spectroscopy (FT-MIR)*. Biotechnol Bioeng, **110**, 252-9.

Fabritz, S., Hörner, S., Könnig, D., Empting, M., Reinwarth, M., Dietz, C., Glotzbach, B., Frauendorf, H., Kolmar, H., Avrutina, O. (2012). *From pico to nano: biofunctionalization of cuboctahedral silsesquioxanes by peptides and miniproteins*. Org Biomol Chem, **10**(31), 6287-93.

García Boy, R., Mier, W., Nothelfer, E.M., Altmann, A., Eisenhut, M., Kolmar, H., Tomaszowski, M., Krämer, S., Haberkorn, U. (2012). *Sunflower Trypsin Inhibitor 1 Derivatives as Molecular Scaffolds for the Development of Novel Peptidic Radiopharmaceuticals*. Mol Imaging Biol, **12**(4), 377-385.

Tischler, M., Nasu, D., Empting, M., Schmelz, S., Heinz, D.W., Rottmann, Ph., Kolmar, H., Buntkowsky, G., Tietze, D., Avrutina, O. (2012). *Braces for the peptide backbone: insights into structure-activity relationships of protease inhibitor mimics with locked amide conformations*. Angew Chem, **124**, 3768-3772, Angew Chem Int Ed., **51**(15), 3708-12.

Reinwarth, M., Nasu, D., Kolmar, H., Avrutina, O. (2012). *Chemical Synthesis, Backbone Cyclization and Oxidative Folding of Cystine-knot Peptides — Promising Scaffolds for Applications in Drug Design*. Molecules, **17**(11), 12533-52.

Sonstige:

Fabritz, S., Maaß, F., Avrutina, O., Heiseler, T., Steinmann, B., Kolmar, H. (2012). *A sensitive method for rapid detection of alkyl halides and dehalogenase activity using a multistep enzyme assay*. AMB Express, **2**(1), 51.

Capito, F., Skudas, R., Stanislawski, B., Kolmar, H. (2012). *Feasibility of attenuated total reflection spectroscopy in monitoring and quantification of antibody and host cell proteins using mammalian cell culture*. 4th Eu Chems Chemistry Congress, Prag.

Hon.-Prof. Dr. S. Neumann

Sonstige:

Neumann, S. (2012). *Systembiologie*. Kapitel 46 in Lottspeich, F. und Engels, F.W. (Hrsg.): *Bioanalytik Springer-Spektrum-Verlag, Heidelberg, 3. Aufl., 1159-1170.*

Prof. Dr. K. Schmitz

Begutachtete:

Waldbaur, A., Waterkotte, B., Schmitz, K., Rapp, B.E. (2012). *Maskless projection lithography for the fast and flexible generation of grayscale protein patterns*. *Small*, **8**(10), 1570–1578.

Jochum, T., Ritz, M.E., Schuster, C., Funderburk, S.F., Jehle, K., Schmitz, K., Brinkmann, F., Hirtz, M., Moss, D., Cato, A.C.B. (2012). *Toxic and non-toxic aggregates from the SBMA and normal forms of androgen receptor have distinct oligomeric structures*. *Biochim Biophys Acta – Mol Basis Disease*, **1822**(6), 1070-1078.

Maddalo, D., Neeb, A., Jehle, K., Schmitz, K., Muhle-Goll, C., Shatkina, L., Walther, T.V., Bruchmann, A., Gopal, S.M., Wenzel, W., Ulrich, A., Cato, A.C.B. (2012). *A Peptidic Unconjugated GRP78/BiP Ligand Modulates the Unfolded Protein Response and Induces Prostate Cancer Cell Death*. *PloS one*, **7**(10):e45690.

Sonstige:

Waterkotte, B., Waldbaur, A., Rapp, B. E., Schmitz, K. (2012). *Strukturierungsmethoden - Mit Proteinen Bilder malen*. *GIT Labor-Fachzeitschrift*, **7**, 537–539.

10. Patente

10.1. Neuanmeldungen 2012

Prof. Dr. H. Kolmar

General Strategy for Antibody Library Screening, M. Becker, T. Heiseler, A. Schumacher, H. Kolmar, Ref. No. EP11009901, 01/2012

Prof. Dr. H. Plenio

Ruthenium-based Metathesis Catalysts and Precursors for their Preparation, L.H. Peeck, H. Plenio, Eur. Pat. Appl. 12159506.0-1211, 03/2012

Ruthenium-based Metathesis Catalysts, Precursors for their Preparation and Use, R. Savka, P. Kos, H. Plenio, Eur. Pat. Appl. 12190416.3, 10/2012

Prof. Dr. J.J. Schneider

Preparation of semiconductor films, R.D. Deshmukh, R. Kügler, J.J. Schneider, R. Hoffmann, WO 2012/000594 A1

Prof. Dr. H. Vogel

Verfahren der heterogen katalysierten Gasphasenpartialoxidation von (Meth)acrolein zu (Meth)acrylsäure, H. Vogel, A. Drochner, N. Blickhan, N. Dürr, T. Jekewitz, N. Menning, T. Petzold, S. Schmidt, A. Karpov, K. Müller-Engel, F. Rosowski, C. Welker-Nieuwoud, Anmelder BASF SE. DE 102012207811 A1, 05/2012

10.2. Bestand an erteilten Patenten und Ersterteilungen 2012

	Bestand	Ersterteilungen		Bestand	Ersterteilungen
B. Albert	2		H. Plenio	3	
P. Claus	11	1	B. Schmidt	7	1
W.-D. Fessner	7		J.J. Schneider	2	1
P. Friedl	5		M. Reggelin	2	
W. Haase	16		M. Rehahn	4	
C. Hess	1		H. Vogel	29	1
H. Kolmar	3				

11. Herausgebertätigkeiten

Prof. Dr. B. Albert

European Editor: *Solid State Sciences*

Prof. Dr. M. Biesalski

Editorial Board Member: *The Open Journal of Macromolecules*

Editorial Board Member: *Soft Materials*

Prof. Dr. G. Buntkowsky

Editorial Board Member: *Solid State NMR Spectroscopy*

Guest Editor: Sonderband Zeitschrift für Physikalische Chemie

Prof. Dr. P. Claus

Editorial Board Member: *The Open Physical Chemistry Journal*

Prof. Dr. W.-D. Fessner

Editorial Board Member: *Journal of Molecular Catalysis B: Enzymatic*

Academic Advisory Board Member: *Advanced Synthesis and Catalysis*

Prof. Dr. F. Müller-Plathe

Editor in Chief: *Soft Materials*

Prof. Dr. R. Schäfer

Editor: *Bunsen-Magazin*

Prof. Dr. B. Schmidt

Editorial Board Member: *Neurodegenerative Diseases*

Editorial Advisory Board: *Recent Patent Reviews on CNS Drug Discovery*

Editorial Advisory Board: *Recent Patent Reviews on Cardiovascular Drug Discovery*

Associate Editor: *Journal of Alzheimer's Disease*

Prof. Dr. J.J. Schneider

Associate Editor: *Beilstein Journal of Nanotechnology*

12. Drittmittel

12.1. Ausgewiesene Drittmittel und Verteilung nach Geldgeber-Gruppen (gemäß Verwaltung der TU Darmstadt)

Nach Geldgebergrp.	Einnahmen in €	Ausgaben in €	Einnahmen in %	Ausgaben in %
LOEWE Summe	1.217.073,29	1.114.617,41	15,14	14,95
Bund Summe	1.381.674,43	1.215.457,52	17,18	16,31
DFG Summe	2.710.142,06	2.708.839,08	33,70	36,34
EU Summe	272.154,42	369.074,48	3,38	4,95
Industrie Summe	2.128.479,62	1.815.962,72	26,47	24,36
Sonstige Summe	331.890,96	230.359,23	4,13	3,09
Gesamtergebnis	8.041.414,78	7.454.310,44	100,00	100,00

Das Aufkommen ist gegenüber 2011 **um 0,7% (rd. 55.000 €) gesunken**.

12.2. Versteckte Drittmittel

Zu den von der Verwaltung ausgewiesenen kommen versteckte Drittmittel, d.h. solche, die nicht durch die TU Darmstadt eingenommen und verausgabt werden. Dabei handelt es sich vor allem um Doktoranden, Post-Docs und Gastwissenschaftler, die nicht über die TU bezahlt werden, sondern durch persönliche Stipendien (Humboldt, DAAD, Stiftungen, Ausländische Regierungen), oder die von ihren Heimatinstitutionen bei weiterlaufender Entlohnung an die TU Darmstadt abgestellt oder beurlaubt wurden (Sabbaticals). Umgerechnet in Gehaltsäquivalenten, beläuft sich die bei den Drittmitteln nicht erfasste Arbeitsleistung auf ca. **351.292 €**.

Zu diesen versteckten Personalmitteln kommen diverse Zuwendungen, Geldspenden, Sachspenden, Schenkungen usw., die direkt an Arbeitsgruppen geleistet wurden. Diese beliefen sich auf ca. **126.540 €**.

Des Weiteren sind zu diesen Drittmitteln noch Mess- und Rechenzeiten an Großforschungseinrichtungen zu rechnen, die auf dem Weg der Antragstellung im Wettbewerb eingeworben wurden. Ihr Geldwert wird auf **183.567 €** geschätzt. Der Hauptanteil (126.000 €) entfällt auf Messzeit am Neutronendiffraktometer am Helmholtz-Zentrum in Berlin (Prof. Dencher).

12.3. Gesamte Drittmittel 2012

Zusammengerechnet belaufen sich die 2012 umgesetzten Drittmittel des Fachbereichs Chemie auf ca. **8.702.814 €**. Darin sind die Drittmittel des Fraunhofer LBF „Bereich Kunststoffe“ nicht enthalten.

12.4. Neu eingeworbene Drittmittel

Die am Fachbereich Chemie tätigen Professoren und leitenden Wissenschaftler haben im Jahr 2012 neue Forschungsanträge gestellt, bzw. sind Kooperationsverträge eingegangen. Die 2012 neu zugesagten (Datum Bewilligungsbescheid, Kooperationsvertrag bzw. Forschungsauftrag) Drittmittel belaufen sich auf ca. **3.46 Mio. €**. In diesem Betrag sind weder versteckte Drittmittel, noch neu akquirierte Projekte des Fraunhofer LBF „Bereich Kunststoffe“ enthalten. Die Projektlaufzeiten liegen überwiegend zwischen 2 und 3 Jahren.

13. Stipendiaten und GastwissenschaftlerInnen am Fachbereich Chemie

Valeria Barbosa

DAAD-Stipendiatin (Prof. Schmidt)

M.Sc. Daniel Alexander Götz

Cusanus Stipendiat (Prof. Schäfer)

Prof. Dr. Hossein Eslami

Persian Gulf University, Boushehr, Iran, Alexander von Humboldt-Stipendiat (Prof. Müller-Plathe)

Parul Goel

DAAD-Stipendiatin (Prof. Schmidt)

M.Sc. Sebastian Klemenz

Stipendiat Darmstädter Exzellenz-Graduiertenschule für Energiewissenschaft und Energietechnik (Prof. Albert)

M. Sc. Stephan Krähling

VCI-Stipendiat (Prof. Schäfer)

Dr. Katarzyna Kuter

Polish Academy of Sciences, Krakau, Polen, Gastwissenschaftlerin (Prof. Dencher)

Dr. Valeri Lapanik

Deputy Director of the Institute of Applied Physics Problems, State University of Belarus, Minsk, Weißrussland (Prof. Haase)

Wei Li

Chinesische Regierung CSC Stipendiatin (Prof. Biesalski)

Prof. Dr. Yuichi Masubuchi

Kyoto Universität, Japan, Gastwissenschaftler (Prof. Müller-Plathe)

Prof. Dr. P.C. Mishra

Department of Physics, Banaras Hindu University, Varanasi, Indien, Alexander von Humboldt Stipendiat (Prof. Berger)

Dr. habil. Serghei Ostrovschi

Institute of Applied Physics, Academy of Sciences of the Republic Moldova, Kischinau, Republik Moldau (Prof. Haase)

Dr. Fedor Podgornov

DFG, Electrical Engineering Technology Laboratory, South Ural State University, Cheljabinsk, Russland (Prof. Haase)

Prof. Dr. Vassilios Raptis

Universität Ioannina, Griechenland, Stipendiat des HPC-Europa2-Programms (Prof. Müller-Plathe)

Dr. Tomasz Ratajczyk

Institute of Organic Chemistry of the Polish Academy of Sciences in Warschau, Polen, Alexander von Humboldt Stipendiant (Prof. Buntkowsky)

Dr. Anna Ryzhkova

DFG, Electrical Engineering Technology Laboratory, South Ural State University, Cheljabinsk, Russland (Prof. Haase)

Carlos Bayon Sanchez

COST Stipendiat (Prof. Fessner)

Dipl.-Ing. Volker Schmidts

Promotionsstipendiat, Studienstiftung des Deutschen Volkes (Prof. Thiele)

Dipl.-Ing. Ali Shayeghi

Promotionsstipendiat, Merck`sche Gesellschaft für Kunst und Wissenschaft (Prof. Schäfer)

Prof. Dr. Jayant K. Singh

Indian Institute of Technolgy, Kanpur, Indien Alexander von Humboldt Stipendiat (Prof. Müller-Plathe)

Ass. Prof. Dr. habil. Zbigniew Tomkowicz

Institute of Physics, Jagellonian University, Krakau, Polen (Prof. Haase)

Huaying Wang

Chinesische Regierung CSC Stipendiatin (Prof. Biesalski)

Bo Han Yang

Universität British Columbia, Vancouver, Kanada, IREP-Programm (Prof. Schneider)

Dong Yi

DAAD-Stipendiat China (Prof. Fessner)

M.Sc. Stefan Zielonka

Promotionsstipendiat, Merck`sche Gesellschaft für Kunst und Wissenschaft (Prof. Kolmar)

14. Extern beschäftigte MitarbeiterInnen des Fachbereichs Chemie

Dipl. Ing. Jovina Addo-Mensa

Doktorarbeit, VW Wolfsburg (Prof. Hess)

M.Sc. Chem. Christopher Alt

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

Dipl. Chem. Jan-Hendrik Arndt

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

Dipl. Chem. Sebastian Barth

Doktorarbeiter Merck KGaA (Prof. Schneider)

Dipl. Chem. Julia Beer

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

M.Sc. Florian Capito

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Kolmar)

M.Sc. Chem. Subin Damodaran

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

M.Sc. Chem. Paul Danelski

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

Dipl. Chem. Nadia El Karazzi

Doktorarbeit Papiertechnische Stiftung Heidenau (Prof. Biesalski)

Dipl. Chem. Simon Forster

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Kolmar)

Dipl. LM Chem. Maria Girrbach

Doktorarbeit, Karlsruher Institut für Technologie (Prof. Schmitz)

Dipl. Chem. Monika Heilmann

Doktorarbeit Paul-Ehrlich-Institut(Prof. Kolmar)

M.Sc. Felix Husslik

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Kolmar)

Dipl.-Ing. Michael Korbus

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Kolmar)

Dipl.-Ing. Christoph Kottlorz

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

Dipl. Chem. Marcus Leistner

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

Dipl. Chem. Tiantan Li

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

Dipl. NanoSc. Rouven Linge

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Rehahn)

Dipl. Chem. Michael Matecki

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

M.Sc. Tech. Dibyaranjan Mekap

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

M.Sc. Chem. Marcel Meub

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

M.Sc. Chem. Matthäus Mlynek

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

M.Sc. Chem. Prabhu Kavimani Nagar

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

Dipl.-Ing. Georgios Passos-Lagos

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

Dipl. Biol. Laura Rhiel

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Kolmar)

Dipl.-Ing. Matthias Schirmer

Doktorarbeit FSU Jena (Prof. Kolmar)

M.Sc. Chem. Tobias Schuster

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

Dipl. Chem. Maryia Shakun

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

Dipl.-Ing. Stefan Urfels

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Vogel)

Dipl.-Ing. Katja Utaloff

Doktorarbeit Fraunhofer LBF Bereich Kunststoffe (Prof. Rehahn)

M.Sc. Sullivan Dias Borges Vianna

Doktorarbeit am Max-Planck-Institut für Polymerforschung (Prof. Müller-Plathe)

Dipl. Biotechnol. Björn Waterkotte

Doktorarbeit, Karlsruher Institut für Technologie (Prof. Schmitz)

Dipl.-Ing. Andreas Wohlmann

Doktorarbeit FSU Jena (Prof. Kolmar)

Dipl. Chem. Stephan Zindel

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Kolmar)

15. Preise und Ehrungen an Mitglieder des Fachbereichs 2012

Heiner Busch (Prof. Vogel)

Posterpreis der DECHEMA, ProcessNet Tagung September 2012

Dehydratisierung von Butanolen in Wasser unter nah- und überkritischen Bedingungen

J. Elbert, M. Gallei, M. Rehahn

Posterpreis des Springerverlags

Water-Soluble Poly(vinylferrocene-b-(ethylene oxide)) Diblock and Mikroarm Star polymers

Dipl. Chem. Dorothea Helmer (Prof. Schmitz)

1. Platz im Regionalwettbewerb FameLab „Talking Science“ für ihren

publikumswirksamen Vortrag *Die Nadel im Heuhaufen – Suche nach Chemokininhibitoren*

Dr.-Ing. Thomas Herrmann (Prof. Busch)

Preis der Familie Bottling-Stiftung für seine ausgezeichnete Dissertation *Modellierung technischer Hochdruck-LDPE-Reaktoren*

Dirk Heyl (Prof. Fessner)

Gewinner des RSC Posterpreises, RSC Carbohydrate COST Tagung, Birmingham

Acetylenedicarboxamides – Powerful Tools for Decorating Scaffolds by Thermal Cycloaddition

PD Dr. Stefan Immel

Athene Preis für Gute Lehre der Carlo und Karin Giersch-Stiftung für seine hervorragend strukturierten Lehrkonzepte für Studierende der Chemie, Biologie und Körperpflege sowie seine Fähigkeit, komplexe Zusammenhänge sehr gut zu vermitteln

Dipl.-Ing. Ružica Kasalo (Prof. Busch)

Posterpreis Polymer Reaction Engineering VIII, Cancun, Mexico

Quantitative NMR spectroscopy analysis for determination of polymer microstructure

Dr.-Ing. Daniel Kieser (Prof. Schmidt)

Kurt-Ruths-Preis 2012 für seine herausragende Dissertation *Methodenentwicklung und Synthese von fluoreszierenden Liganden für die Diagnostik von Morbus Alzheimer*

Dipl.-Ing. Andreas Kolmer (Prof. Thiele)

EUROMAR Studentenstipendium, Dublin, UK

M.Sc. Jens Löber (Prof. Busch) und **M.Sc. Bastian Opitz** (Prof. Vogel)

Ernst Berl-Medaille der Chemietechnologen für ihren hervorragenden Masterabschluss in der Technischen Chemie

Dr.-Ing. Nils Christopher Meyer (Prof. Thiele)

SMASH Studentenstipendium, Rhode Island, USA

Posterpreis, 14th IUPAC Konferenz on Polymers and Organic Chemistry, Doha, Qatar
Helical Chiral Polyacetylenes as Highly Enantiodifferentiating Orienting Media for Organic Compounds

Dipl.-Ing. Matthias Möller (Prof. Albert)

Alarich-Weiss-Preis 2012 für seine herausragende Diplomarbeit *Synthese und Charakterisierung der Zintl-Phase CaZnSn*

Tobias Montag (Prof. Thiele)

Zum Vortrag aufgewertetes Poster, 44th Annual Discussion Meeting GDCh FGMR, Halle
Crosslinked helically chiral poly-(γ -benzyl-L-glutamate) as enantiodifferentiating alignment medium

Hon. Prof. Dr. Siegfried Neumann

2. Preis als Coach für das internationale Doktorandenteam zum Thema innovative pharmazeutische Konzepte beim **Innovation Cup 2012** der Merck Serono

Christian Pfeifer (Prof. Vogel)

Posterpreis der DECHEMA, ProcessNet Tagung
Hydrothermale Carbonisierung - Rückschlüsse von Modellkomponenten auf reale Biomassen

C. Schäfer, M. Gallei, M. Rehahn

Erster Posterpreis Wiley-VCH, Smart Polymers, Mainz
Light and Mechanical Stress-Responsive Synthetic Opals

Prof. Dr. Boris Schmidt

Alzheimer Forschungspreis 2012 der Hans und Ilse Breuer-Stiftung für seine hervorragenden Arbeiten auf dem Gebiet der Wirkstoffforschung gegen pathologische Proteinablagerungen bei der Alzheimer-Krankheit und anderen neurodegenerativen Erkrankungen

Dipl.-Ing. Volker Schmidts (Prof. Thiele)

Preis der Vereinigung von Freunden der TU Darmstadt für seine hervorragende Diplomarbeit *Computergestützte Auswertung von Residualen Dipolaren Kopplungen*

R. Staff, M. Gallei, M. Mazurowski, M. Rehahn, K. Landfester, D. Crespy

Erster Posterpreis Wiley-VCH, Makromolekulares Kolloquium, Freiburg
New Functional Colloidal Morphologies from Block Copolymer Assembly in Droplets

M.Sc. Stefan Zielonka (Prof. Kolmar)

Promotionsstipendium 2012 der Merck'schen Gesellschaft für Kunst und Wissenschaft e.V.

Preisträger der Dr. Anton-Keller-Stiftung

Nico Apel (B.Sc., Prof. Schäfer), Anne Atenhan (B.Sc., Prof. Dencher), Daniel Degreif (B.Sc., Prof. Bertl), Johannes Elbert (M.Sc., Prof. Rehahn), Stefan Göring (M.Sc., Prof. Schmidt), Christine Lachnit (B.Sc., Prof. Thiel), Jens Löber (M.Sc., Prof. Busch), Thomas Pirzer (B.Sc., Prof. Kolmar), Oliver Rauh (B.Sc., Prof. Bertl), Edgar Sawatzky (M.Sc., Prof. Kolmar)

16. Beteiligung an laufenden Verbundprojekten

Name des Verbundes	Geldgeber	Teilnehmer
Exzellenzcluster 259: <i>Smart Interfaces – understanding and designing fluid boundaries</i>	Exzellenzinitiative Bund und Land	van der Vegt, N., Müller-Plathe, F., Biesalski, M., Rehahn, M.
Forschergruppe 934: <i>NMR-Spektroskopische Bestimmung relativer und absoluter Konfigurationen gelöster Moleküle in orientierenden Medien</i>	DFG	Berger, R., Reggelin, M. (Sprecher) , Thiele, C.M.
Forschergruppe 1583: <i>Wasserstoffbrückenbildende Flüssigkeiten bei Anwesenheit innerer Grenzflächen unterschiedlicher Hydroaffinität</i>	DFG	Buntkowsky, G. (Kosprecher) , Hess, C.
Graduiertenkolleg 1657/1: <i>Molekulare und zelluläre Reaktionen auf ionisierende Strahlung</i>	DFG	Dencher, N.A., Schmidt, B.
Graduiertenkolleg 1037: <i>Tunable Integrated Components in Microwave Technology and Optics (TICMO)</i>	DFG	Haase, W.
GSC 1070: <i>Darmstädter Graduiertenschule für Energiewissenschaft und Energietechnik</i>	DFG	Albert, B., Claus, P., Vogel, H.
SFB 595: <i>Elektrische Ermüdung in Funktionswerkstoffen</i>	DFG	Buntkowsky, G., Hess, C., Rehahn, M.
SFB-TRR75: <i>Tropfendynamische Prozesse unter extremen Umgebungsbedingungen, Teilprojekt A4: Molekular-dynamische Simulationen der Tropfenverdampfung unter Nichtgleichgewichtsbedingungen</i>	DFG	Müller-Plathe, F., van der Vegt, N.
SPP 1569: <i>Generation of multifunctional inorganic materials by molecular bionics</i>	DFG	Albert, B., Berger, R., Schneider, J.J., van der Vegt, N.
SPP 1369: <i>Polymer-Festkörper-Kontakte: Grenzflächen und Interphasen</i>	DFG	Müller-Plathe, F. (Sprecher) , Rehahn, M., Schneider, J.J.
SPP 1191: <i>Ionische Flüssigkeiten – Multiscale Simulations on the Structure and Dynamics of Ionic Liquids</i>	DFG	Berger, R., Müller-Plathe, F.
SPP 1570: <i>Poröse Medien mit definierter Porenstruktur in der Verfahrenstechnik – Modellierung, Anwendung, Synthese</i>	DFG	Müller-Plathe, F., Schneider, J.J.
SPP 1613: <i>Regenerativ erzeugte Brennstoffe durch lichtgetriebene Wasserspaltung</i>	DFG	Schäfer, R.

Name des Verbundes	Geldgeber	Teilnehmer
SPP 1623: <i>Chemoselektive Reaktionen für die Synthese und Anwendung funktionaler Proteine</i>	DFG	Kolmar, H.
SPP1420: <i>Biomimetic Materials Research: Functionality by Hierarchical Structuring of Materials</i>	DFG	Van der Vegt, N.F.A.
Emmy-Noether-Programm: <i>Struktur-Aktivitäts-Beziehungen von biologisch oder katalytisch aktiven Spezies aus der durch NMR bestimmten 3D-Struktur; integriert in der Forschergruppe 934</i>	DFG	Thiele, C.M.
<i>Monitoring CAlytic reactions on Nanoparticles by solid state NMR/ a joint experimental theoretical approach: MOCA-NANO</i>	DFG	Buntkowsky, G.
IN-TEG: <i>Innovative Materialien und Generatoren für die thermoelektrische Energiegewinnung der Zukunft</i>	BMBF	Albert, B.
<i>CO₂RRECT – Verwertung von CO₂ als Kohlenstoff-Baustein unter Verwendung überwiegend regenerativer Energien</i>	BMBF	Claus, P.
<i>CO₂-DREAM-Reaction - Stoffliche Verwertung von CO₂</i>	BMBF	Claus, P.
<i>HY-Silp - Entwicklung von neuartigen, ressourcenschonenden Technologien unter Einsatz von Supported Ionic Liquid Phase (SILP) Katalysatoren</i>	BMBF	Claus, P.
<i>GerontoSys: Mitochondriale Netzwerke von Signalwegen bei der Alterung und der Lebensspannenkontrolle - ein systembiologischer Ansatz</i>	BMBF	Dencher, N.A.
<i>ERA Net EuroTransBio-5: Effiziente Produktion von neuen chiralen Substanzen durch verbesserte industrielle Aldolasen</i>	BMBF	Fessner, W.-D.
<i>Erforschung neuer diagnostischer Tracer mit Hilfe biotechnologischer Verfahren - BIOTRACE</i>	BMBF	Kolmar, H.
<i>Bioindustrie 2021: Funktions- und strukturbasierte Aufreinigung und Analytik werthaltiger Chemikalien und Pharmaprodukte - BIOPUR</i>	BMBF	Kolmar, H.
<i>NANOKAT - Katalytische Nanokomplexe zur Synthese von Werkstoffen</i>	BMBF	Kolmar, H.
<i>Gi3: Entwicklung von radionuklidgekoppelten mikroproteinbasierten Leitstrukturen gegen definierte Zielstrukturen mittels evolutivem Protein Design</i>	BMBF	Kolmar, H.
<i>Molecular Diagnosis of Neurodegenerative Disease in the Eye (MINDe)</i>	BMBF	Schmidt, B.

Name des Verbundes	Geldgeber	Teilnehmer
<i>IKT2020: Nanoskalige gedruckte Hybridmaterialien als aktive Funktionselemente in nanostrukturierten Sensorbauteilen - PrintSens</i>	BMBF	Schneider, J.J. (Koordinator)
<i>ELEMENT: Elektromechanische Sensoren mit eindimensionalen Nanoobjekten</i>	BMBF	Schneider, J.J.
<i>REFKAT – Entwicklung von ressourceneffizienten Autoabgaskatalysatoren mit deutlich reduziertem Gehalt an Edelmetall und Seltenerdmetall</i>	BMBF	Vogel, H.
<i>Hybrid-Kat: Neuentwicklung von Abgaskatalysatoren für Diesel-Hybrid-Fahrzeuge</i>	BMBF	Vogel, H.
<i>Erarbeitung der Verfahrensgrundlagen zur einstufigen Konversion von alkoholischen Fermenterausträgen zu den entsprechenden reinen Olefinen</i>	BMELV/FNR	Vogel, H.
FP-7 REGPOT NANOEXCELL	EU	Buntkowsky, G.
CM0701: <i>Cascade Chemoenzymatic Processes - New Synergies Between Chemistry and Biochemistry</i>	EU e-COST	Fessner, W.-D.
ERC Starting Grant – RDC@catalysis	EU	Thiele, C.M.
<i>Soft Control. Mit Polymeren Funktionen an Grenzflächen effizient schalten</i>	LOEWE	Biesalski, M. (Sprecher) , Buntkowsky, G., Brunsen, A., Müller-Plathe, F., Plenio, H., Reggelin, M., Rehahn, M., Thiele, C.M.
LOEWE-AdRIA (Adaptronik-Research, Innovation, Application): <i>adaptives Auto, adaptiver Tilger</i>	LOEWE	Rehahn, M.
TU-Forschungscluster <i>Moderne Materialien und Werkstoffe</i>	TU Darmstadt	Albert, B., Biesalski, M. Schneider, J.J.
MerckLab – <i>Printable Electronics</i>	Merck KGaA/TU Darmstadt	Rehahn, M., Schneider, J.J.
UPM-Labor	Industrie/TU Darmstadt	Biesalski, M., Rehahn, M.
Wissenschaftliche und technische Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Neutronenstreuung	Helmholtz- Zentrum Berlin GmbH	Dencher, N.A.

17. Kooperationen

Die von den einzelnen Arbeitsgruppenleitern benannten „bis zu 3 wichtigsten Kooperationspartner“ verteilen sich 2012 nach Art und Geographie wie folgt:

	Industrie	Akademisch	Gesamt
Darmstadt	4	15	19
Deutschland	17	18	35
Europa	-	9	9
Nordamerika, Australien, Japan	2	4	6
Welt	2	4	6
Gesamt	25	50	75
<u>In Prozent:</u>			
	Industrie	Akademisch	Gesamt
Darmstadt	5	20	25
Deutschland	23	24	47
Europa	0	12	12
Nordamerika, Australien, Japan	3	5	8
Welt	3	5	8
Gesamt	34	66	100

18. Veranstaltungen

von Mitgliedern des Fachbereichs (mit-)organisiert

Prof. Dr. B. Albert

Workshop on International Publishing, *Life as a part-time editor of an Elsevier Journal*, Fachbereich Chemie, Darmstadt, 2012

16. Vortragstagung der Fachgruppe Festkörperchemie und Materialforschung der GDCh, *Materialchemie für Energie- und Ressourcennutzung*, Darmstadt, September 2012

Prof. Dr. R. Berger

GDCh-Kolloquium, Ortsverband Darmstadt, Wintersemester 2011/2012

Prof. Dr. M. Biesalski, Dr.-Ing. M. Gattermayer

2. Darmstädter Papierchemie Kolloquium, *Papier – neue Eigenschaften, neue Anwendungsgebiete*, Darmstadt, Mai 2012

Prof. Dr. P. Claus

5. Südwestdeutscher Katalyse-Lehrverbund, Darmstadt, September 2012

Prof. Dr. W.-D. Fessner

MECP12, *Multistep Enzyme-Catalyzed Processes*, Graz, April 2012

Hon. Prof. Dr. Klaus Griesar

Leiter Euroforum-Seminar, *Kompaktwissen Chemieindustrie*, Heidelberg, Juni 2012

Fortbildungsprogramm der GDCh, *Management von Forschung und Entwicklung in der chemischen Industrie*, Frankfurt a.M., September 2012

PD Dr. R. Meusinger

Mitternachtsexperimentalshow *Bei uns stimmt die Chemie* zum Heinerfest, Darmstadt, Juni 2012

Experimentalvorlesung für Schüler, Merck/FB Chemie der TU Darmstadt, Juni 2012

Basiskurs *NMR-Spektrenauswertung*, GDCh, Frankfurt, April 2012

Fortgeschrittenenkurs *NMR-Spektrenauswertung*, GDCh, Frankfurt, Oktober 2012

Wissenschaftshistorische Stadtführung *Auf den Spuren der Chemie in Darmstadt* mit historischen Experimenten, Darmstadt Marketing GmbH, Mai 2012

Prof. Dr. F. Müller-Plathe

EURADH 2012: 9th European Adhesion Conference, Friedrichshafen, September 2012

Hon. Prof. Dr. S. Neumann

Drittmittelförderung in der Gesundheitsforschung aus der Sicht eines Gutachters, Junior GBM Darmstadt, Mai 2012

Prof. Dr. M. Reggelin

Mitternachtsexperimentalshow *Bei uns stimmt die Chemie* zum Heinerfest, Darmstadt, Juni 2012

Prof. Dr. R. Schäfer

Programmkomitee der Bunsentagung, Leipzig, Mai 2012

Prof. Dr. K. Schmitz

BioInterfaces International Graduate School Workshop on Presentation Skills, Karlsruhe, März 2012

Prof. Dr. N.F.A. van der Vegt

Symposium, *Multiscale Modelling*, Darmstadt, Februar 2012

Prof. Dr. H. Vogel

8. Jahrestreffen der Chemietechnologen, Darmstadt, Juli 2012

19. Außenwirkung

Prof. Dr. B. Albert

Päsidentin der GDCh; Vorstandsmitglied der Fachgruppe *Festkörperchemie und Materialforschung*; Mitglied im Vorstand der ProcessNet-Fachsektion *Anorganisch-technische Chemie* (DECHEMA)

Dr.-Ing. H.-J. Bär

Mitwirkung an zahlreichen Veranstaltungen zur Vorstellung des Chemiestudiums und der Forschungsaktivitäten des Fachbereichs Chemie (hobit, TUDay, etc.); Vorbereitungsseminar für die 2. Runde der Chemie-Olympiade Hessen-Thüringen

Prof. Dr. R. Berger

GDCh-Ortsverbandvorsitzender Darmstadt

Prof. Dr. M. Biesalski

Mitglied des Clusters Papierforschung (CPF); ständiger Gast des INFOR-Forschungsrats des Verbands der Papierfabriken e.V. (VDP); Sonderfachgutachter der AiF Gruppe Kunststoffe

Prof. em. Dr. J. Brickmann

Geschäftsführer der MOLCAD GmbH; Gesellschafter und wissenschaftl. Direktor der succidia AG

Prof. Dr. G. Buntkowsky

Mitglied DFG Fachkollegium 304 *Analytik/Methodenentwicklung*

Prof. Dr. M. Busch

Berufenes Mitglied im Beirat ProcessNet-Fachausschuss für Hochdruckverfahrenstechnik (DECHEMA und VDI-GVC); berufenes Mitglied im ProcessNet-Arbeitsausschuss Polyreaktionen und Reaktionstechnik sicherheitstechnisch schwieriger Prozesse; berufenes Mitglied in der EFCE Working Party on Polymer Reaction Engineering (Chair); berufenes Mitglied in der IUPAC Working Party on Modeling of Polymerization Kinetics and Processes

Prof. Dr. P.Claus

Mitglied im Kompetenznetzwerk ConNeCat – Südwestdeutscher Katalyse-Lehrverbund; Mitglied der GeCatS-Kommission (GermanCatalysisSociety)

Prof. Dr. W.-D. Fessner

Vertrauensdozent des Fonds der Chemischen Industrie/VCI

Prof. Dr. P. Friedl

Mitglied des Aufsichtsrats der Firma CytoTools AG, Darmstadt

Hon. Prof. Dr. K. Griesar

Mitglied des BDI-Arbeitskreises *Wertschöpfungsorientierte Innovationsstrategien*; Mitglied in der Kommission für Fortbildung der GDCh; Mitglied im Arbeitskreis *Chemie-start ups* im Verband der Chemischen Industrie (VCI); Vorsitzender des Arbeitskreises *Wirtschaftschemie an den Universitäten* der Vereinigung für Chemie und Wirtschaft; Vertreter der Berufspraxis im Fachausschuss *Chemie* der ASIIN; Mitglied im Kuratorium der *Nachrichten aus der Chemie*; Mitglied im Ständigen Ausschuss der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie; Mitglied der acatech Projektgruppe *Mobilisierung von Bildungspotenzialen für die MINT-Fachkräftesicherung/Duales Studium*, Mitglied im Vorstand der *Vereinigung von Freunden der TU Darmstadt*

Dipl. Chem. D. Helmer/B. Waterkotte
Science Slam Hörspieltage am ZKM Karlsruhe

Prof. Dr. H. Kolmar
Wissenschaftlicher Beirat der Firma Sloning BioTechnology GmbH; Direktor des Zentrums für Lehrerbildung der TU Darmstadt

Prof. em. Dr. G. Luft
Mitglied im ProcessNet-Fachausschuss für Sicherheitstechnik (DECHEMA und VDI-GVC); Mitglied im Beirat der Fritz und Margot Faudi-Stiftung

PD Dr. R. Meusinger
Dozent an der Hochschule Fresenius; Merck-TU Darmstadt Experimentalvorlesung für Schüler; Mitternachtsexperimentalshow *Bei uns stimmt die Chemie* zum Heinerfest Darmstadt; Experimentalvorlesung für Schüler, Merck/FB Chemie der TU Darmstadt; Weihnachtsvorlesung des Fachbereichs Chemie

Hon. Prof. Dr. S. Neumann
Vorsitzender des Gutachtergremiums für die BMBF-Fördermaßnahmen *Validierung innovativer Potenziale aus der wissenschaftlichen Forschung* (VIP); Mitglied der internationalen Gutachterkommission für das BMBF-Förderprojekt *Deutsches Konsortium für Translationale Tumorforschung*; Mitglied des Gutachtergremiums für die BMBF-Fördermaßnahme *GerontoSys* (Systembiologie des Alterns); Mitglied des Gutachtergremiums für das deutsch-slowenische Forschungskonsortium *SysTher*; Mitglied der Gutachtergremien für die systembiologischen BMBF-Förderprogramme *e:bio* und *med*; Mitglied des internationalen wissenschaftlichen Beirats für das DFG-Exzellenzclusters *CellNetworks* und der Forschungseinrichtung *BioQuant* der Universität Heidelberg; Sprecher des wissenschaftlichen Beirats der Medizinischen Fakultät der Universität Rostock; Mitglied des wissenschaftlichen Beirats des Spitzenforschungsclusters *Taschentuchlabor* der Universität Potsdam; Mitglied des wissenschaftlichen Beirats für den Development Fund des DKFZ; Mitglied des wissenschaftlichen Beirats für *Oncotryol*; Mitglied des internationalen wissenschaftlichen Beirats für das nationale BMBF-Forschungsnetzwerk *The virtual Liver*

Prof. Dr. H. Plenio
StudEx Veranstaltungen im Rahmen des AC-Grundpraktikums für Chemielehrerstudierende

Prof. Dr. M. Reggelin
Festredner der 2. Runde der Chemie-Olympiade Hessen-Thüringen; Merck-TU Darmstadt Experimentalvorlesung für Schüler; Mitternachtsexperimentalshow *Bei uns stimmt die Chemie* zum Heinerfest Darmstadt; Weihnachtsvorlesung des Fachbereichs Chemie

Prof. Dr. M. Rehahn

Leiter des Bereichs Kunststoffe im Fraunhofer-Institut für Betriebsfestigkeit und Systemzuverlässigkeit LBF; Mitglied des Aufsichtsrates des Fachinformationszentrums FIZ Chemie Berlin; AiF-Gutacher; Stellvertretender Vorsitzender des Vorstands des Wissenschaftlichen Rates der AiF; Mitglied des Präsidiums der AiF; Sprecher der TU Darmstadt im NanoNetzWerk Hessen; Vorsitzender der Gutachtergruppe 1 (Werkstoffe) der AiF; Mitglied des Technisch-Wissenschaftlichen Beirats der HZG (Helmholtz-Gemeinschaft, Geesthacht); Vorsitzender des Technisch-Wissenschaftlichen Beirats der GKSS (Helmholtz-Gemeinschaft, Geesthacht); Mitglied des Technisch-Wissenschaftlichen Beirats des Leibniz-Instituts für Polymerforschung (IPF, Dresden);

Prof. Dr. B. Schmidt

Stellvertretendes Mitglied der Ethikkommission der TU Darmstadt; zahlreiche Zeitungsberichte zu Wirkstoffe gegen Alzheimer

Prof. Dr. K. Schmitz

Austrägerin des TU Darmstadt Sonderpreises im Landeswettbewerb *Jugend forscht*

Prof. Dr. J.J. Schneider

Mitglied des erweiterten Vorstandes des Mikro-Nano Netzwerkes Rhein-Main (mst); Wissenschaftlicher Leiter der Arbeitsgruppe Mikro-Nanointegration im mst-Netzwerk

Prof. Dr. C.M. Thiele

Direktorin des NMR-Zentrums der TU-Darmstadt; Mitglied des Vorstands der GDCh-Fachgruppe *Magnetische Resonanzspektroskopie*; Mitglied des wissenschaftlichen Komitees der Sino-German Frontiers of Chemistry Tagung; Mitglied des wissenschaftlichen Komitees der EUROMAR; Vorstand des wissenschaftlichen Komitees der SMASH

Prof. Dr. H. Vogel

Vorsitzender des Arbeitsausschusses *Technische Reaktionen* der DECHEMA; Mitglied der Gutachtergruppe 5 der AiF

Dr. K. Wannowius

StudEx Veranstaltungen im Rahmen des AC-Grundpraktikums für Chemielehrerstudierende; Chemie für Schüler; Merck – TU Darmstadt – Juniorlabor, Schnuppertage für Schülerinnen, Lehrerfortbildungsveranstaltungen, Vorbereitungsseminar für die 2. Runde der Chemie-Olympiade Hessen-Thüringen

19.1. Beratungstätigkeit für Firmen, Verbände, etc.

Prof. Dr. M. Biesalski:	Außeruniversitäres Forschungsinstitut im Bereich Oberflächenchemie und -physik; Unternehmen im Bereich Papierverarbeitung/-veredelung
Prof. Dr. M. Busch:	nationale und internationale Industrieunternehmen
Prof. Dr. P. Friedl:	Wissenschaftlicher Beirat CytoTools AG
Prof. Dr. H. Kolmar:	Pharma- und Biotechnologieunternehmen in Deutschland
Prof. i.R. Dr.-Ing. G. Luft:	nationale und internationale Industrieunternehmen
PD Dr. R. Meusinger:	Merck KGaA, Zedira GmbH, Jennewein Biotechnologie GmbH
Prof. Dr. F. Müller-Plathe:	LT Concepts GmbH
Hon. Prof. Dr. S. Neumann:	Projekte des Technologietransfers am DKFZ Heidelberg, Merck Serono im Konzeptwettbewerb Innovation Cup
Prof. Dr. B. Schmidt:	Hoffmann-La Roche AG, Mentor im SciMento-Programm

20. Laufende und geplante Forschungsvorhaben

Drittmittelanträge, Industriekooperationen

Prof. Dr. B. Albert

DFG AL 536/9-1, *Superconductivity and magnetism in the phase diagram of bulk $La_{2-x}Ce_xCuO^{4+}$ -delta investigated by muon-spin spectroscopy and neutron scattering*

DFG AL 536/10-1, *Synthese und Charakterisierung neuer keramischer Sensormaterialien zur Messung von Temperaturen und Gaszusammensetzungen*

DFG SPP 1569, *Generation of multifunctional inorganic materials by molecular bionics, Generation of composites from borides with tuneable electrical conductivities using peptides optimized by genetic engineering, characterization of the bio-solid interactions by modelling and AFM*

BMBF-Verbundprojekt IN-TEG, *Innovative Materialien und Generatoren für die thermoelektrische Energiegewinnung der Zukunft* mit BASF, Daimler, Boysen, MPI Chemische Physik fester Stoffe, DLR und Universität Gießen; Teilprojekt *Synthese und Charakterisierung von Zintl-Phasen*

DFG, Graduiertenschule 1070, *Energiewissenschaft und Energietechnik*

TU Darmstadt Forschungscluster, *Moderne Materialien und Werkstoffe*

LOEWE Forschungsschwerpunkt, *RESPONSE – Ressourcenschonende Permanentmagnete durch optimierte Nutzung seltener Erden*

Prof. Dr. R. Berger

DFG SPP 1191 Ionische Flüssigkeiten, *Multiscale Simulations on the Structure and Dynamics of Ionic Liquids*

DFG FOR 934, *Analysis and prediction of anisotropic nuclear magnetic resonance parameters*

DFG SPP 1569, *Generation of multifunctional inorganic materials by molecular bionics, Generation of composites from borides with tuneable electrical conductivities using peptides optimized by genetic engineering, characterization of the bio-solid interactions by modelling and AFM*

LOEWE Forschungsschwerpunkt, *Elektronendynamik CHiraler Systeme (ELCH)*

Prof. Dr. M. Biesalski

LOEWE-Schwerpunkt Koordinator, *Soft Control. Mit Polymeren Funktionen an Grenzflächen effizient schalten*

Exzellenzcluster 259, *Smart Interfaces – understanding and designing fluid boundaries*

UPM-TUD Lab, *Entwicklung neuartiger Komposit-Kunststoffmaterialien auf Basis nachwachsender Rohstoffe*

INFOR Forschungsrat des Verbands der Papierfabriken (VDP)

Projekt Papierindustrie

Interdisziplinäre Forschungsinitiative an der TU Darmstadt, *Papiermaterialien in der Architektur*

TU Darmstadt Forschungscluster, *Moderne Materialien und Werkstoffe*

Jun. Prof. A. Brunsen

LOEWE-Schwerpunkt Soft Control, *Mesoporous Polymerhybrid Membranes: Directed and Gated Transport Phenomena*

Prof. Dr. G. Buntkowsky

DFG Forschergruppe 1583 (Kosprecher), *Chemisch modifizierte Silicamaterialien als Modellsysteme zur Charakterisierung von Wasser-Oberflächen-Wechselwirkungen*

DFG Bu-911-19, *Dynamic Nuclear Polarization as a Novel Tool for the Characterization of Surfaces and Interfaces of Catalysts and Hybrid Materials*

DFG Verbundprojekt, *Monitoring Catalytic reactions on Nanoparticles by solid state NMR - a joint experimental theoretical approach: MOCA-NANO*

DFG-Bu 911-15-1, *Solid State NMR studies on the mechanisms of immobilized organic-inorganic metal containing heterogeneous catalysts*

DFG-Bu 911-15-1, *Simulations and Novel Catalytic Schemes for Sensitivity Enhancement in Biomedical Applications of Magnetic Resonance by Para-Hydrogen Induced Nuclear Polarization*

DFG SFB-595, *Charakterisierung der Struktur-Eigenschaftsbeziehungen elektrischer Funktionsmaterialien mit Festkörper-NMR-Verfahren*

GIF, *Bioorganic-Inorganic Functionalized Interfaces studied at the molecular Level by Solid State NMR*

LOEWE-Schwerpunkt, *Soft Control. Mit Polymeren Funktionen an Grenzflächen effizient schalten*

BMBF, AIF PRO-INNO-II, *Magnetic Resonance Assisted Photodynamic Therapy (MR-PDT)*

EU, FP7PEOPLE-2009-PHIPSPIN, *Towards long-lived hyperpolarized spin-state*

Prof. Dr. M. Busch

LyondellBasell Polyolefine GmbH, *Modellierung technischer Hochdruck-LDPE Reaktoren II*

LyondellBasell Polyolefine GmbH, *Untersuchung von EVA-Copolymeren für LupotechT*

Dow Europe GmbH & Dow Plastics, *Ethylenhochdruckpolymerisation*

Innospec Limited, *Hochdrucksynthese von Fließverbesserern*

Japan Polyethylene Corporation, *Industrieprojekt*

Nova Chemicals, *Industrieprojekt*

Thai Polyethylene Corporation, *Industrieprojekt*

Sabic, *LDPE-Forschung*

Prof. Dr. P. Claus

DFG, Graduiertenschule 1070, *Energiewissenschaft und Energietechnik*

BMBF-Verbundprojekt, *CO₂RRECT – Verwertung von CO₂ als Kohlenstoff-Baustein unter Verwendung überwiegend regenerativer Energien*

BMBF-Verbundprojekt, *CO₂-Dream-Reaction – Stoffliche Verwertung von CO₂*

BMBF-Verbundprojekt, *HY-SILP – Entwicklung von neuartigen, ressourcenschonenden Technologien unter Einsatz von Supported Ionic Liquid Phase (SILP) Katalysatoren*

4 Industrieprojekte zur *Heterogenen Katalyse und Reaktionstechnik*

Projekt mit der Fritz und Margot Faudi-Stiftung

LOEWE Forschungsschwerpunkt, *ELF – Elektronenmikroskopie an Funktionsmaterialien*

Prof. Dr. N.A. Dencher

BMBF-Projekt, *GerontoSys: Mitochondriale Netzwerke von Signalwegen bei der Alterung und der Lebensspannenkontrolle – ein systembiologischer Ansatz*

DFG, Graduiertenkolleg 1657/1, *Molekulare und zelluläre Reaktionen auf ionisierende Strahlung*

Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH, *Wissenschaftliche und technische Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Neutronenstreuung*

DAAD Programm, *Parkinson Demenz*

Prof. Dr. W.-D. Fessner

BMBF-Verbundprojekt, ERA Net EuroTransBio-5, *Effiziente Produktion von neuen chiralen Substanzen durch verbesserte industrielle Aldolasen*

EU/COST CM0701, *Cascade Chemoenzymatic Processes - New Synergies between Chemistry and Biochemistry*

EU/COST, *Systems Biocatalysis*

DFG, Fe 244/7-2, *Directed evolution of transaldolases for novel specificities*

Industrieprojekt Forschungszentrum Jülich und c-LEcta GmbH

DAAD, *Enzym-Katalysierte Synthese von Sialokonjugaten*

DAAD/ARC, *Directed evolution of neuraminic acid aldolase*

DAAD DST Programm, *Development of new Ntn-hydrolases for the efficient deracemization of drug precursors*

Prof. i.R. Dr. W. Haase

DFG GRK 1037, *Steuerbare integrierbare Komponenten der Mikrowellentechnik und Optik*

DFG, LC-Nanokomposite, *Untersuchungen der LC/Nanopartikel-Interaktion und der dielektrischen Eigenschaften im Frequenzbereich von 10-14 Hz bis 50 GHz für steuerbare Hochfrequenzbauelemente*

DFG, *Elektrooptische und dielektrische Eigenschaften von flüssigkristallinen Nanokompositen*

BMBF/IB, *Röntgenographische und elektrooptische Untersuchungen neuer LC/Hybridmaterialien für elektrooptische Anwendungen*

BMBF/IB, *Elektromigration von Mikropartikeln*

BMBF/IB, *Flüssigkristalline Nanokomposite*

BMBF/IB, *Dispersion von Nanopartikeln in flüssigen Kristallen*

Prof. Dr. C. Hess

DFG FOR 1583, *Herstellung und kontrollierte Oberflächenfunktionalisierung von mesoporösen SiO₂-Materialien und Ionenspur-Nanokanälen*

DFG SFB 595, Teilproj. B8, *In situ Diagnostik von Interkallationsbatterien mittels Ramanspektroskopie*

DFG, *Mechanismus der NO_x-Einspeicherung in Cerdioxidhaltigen Speicher-Reduktions-Katalysator-Materialien*

Prof. Dr. H. Kolmar

DFG SPP 1177, *Directed Evolution to Optimize and Understand Molecular Biocatalysts*

DFG SPP 1623, *Chemoselective Reactions for the Synthesis and Application of Functional Proteins*

BMBF, *Bioindustrie 2021: Funktions- und strukturbasierte Aufreinigung und Analytik werthaltiger Chemikalien und Pharmaprodukte - BIOPUR*

BMBF, *BIOTRACE: Biotechnologische Verfahren zur Identifizierung und Entwicklung neuer diagnostischer Tracer*, Teilprojekt *Erforschung hochaffiner Miniproteine*

BMBF, *Ci3, Entwicklung von radionuklidgekoppelten mikroproteinbasierten Leitstrukturen gegen definierte Zielstrukturen mittels evolutivem Protein Design*

BMBF, *NANOKAT: Katalytische Nanokomplexe zur Synthese von Werkstoffen*

Internationale Zusammenarbeit in Bildung und Forschung mit Südafrika, SUA 10/12

Industrieprojekte mit Metabolic Explorer, BionTech/TRON, Merck KGaA

LOEWE-Schwerpunkt, *Soft Control. Mit Polymeren an Grenzflächen Funktionen effizient schalten*

Prof. Dr. F. Müller-Plathe

Bund/Land, *Excellenzcluster 259, Smart Interfaces – understanding and designing fluid boundaries*

DFG SPP 1191 *Ionische Flüssigkeiten, Viscosities and other dynamic properties of ionic liquids by molecular dynamics simulations and structure-properties relations*

DFG SPP 1570 *Poröse Medien mit definierten Porenstruktur in der Verfahrenstechnik, Teilprojekt: Carbon Nanotubes as Porous Membranes for Selective Gas Adsorption and Desorption*

DFG SFB-TRR75 *Tropfendynamische Prozesse unter extremen Umgebungsbedingungen, Molekulardynamische Simulation zur Tropfenverdampfung im nichtlinearen Antwortbereich*

DFG-SPP 1369 *Polmer-Festkörper-Kontakte: Grenzflächen und Interphasen (Sprecher), The formation of a polymer interphase near a solid boundary during the curing of a reactive system, simulated by reactive molecular dynamics; A coupled MD-FE simulation method accounting for interphases in nanoparticle filled thermoplastics*

DFG, *Molekulardynamik-Untersuchungen der Auswirkung von Additiven auf die Fluidität von Lipidmembranen*

DFG SFB TRR 149, *Multiscale Simulation Methods for Soft MatterSystems*

EU Projekt FP7-NMP-2013-SMALL-7, *Virtual Design Laboratory (VIDEL) - Computational Framework for design of new materials and devices*

LOEWE-Schwerpunkt, *Soft Control. Teilprojekt: Molekulare Simulation von licht-schaltbaren Polymeren – vom lokalen Konformationsübergang zur Veränderung der makroskopischen Eigenschaften*

Prof. Dr. H. Plenio

DFG PL 178/13-1, *NHC_{ewg}-Liganden für die Olefin-Metathese*

DFG PL 178/12-1, *Paralleles Multisubstrat-Screening Pd-katalysierter Kupplungsreaktionen*

LOEWE-Schwerpunkt, *Soft Control. Mit Polymeren an Grenzflächen Funktionen effizient schalten*

FIF, *Bitumen – Straßenbindemittel im 3. Jahrtausend*

Industrieprojekte

Prof. Dr. M. Reggelin

DFG FOR 934 (Sprecher), *NMR-Spektroskopische Bestimmung relativer und absoluter Konfigurationen gelöster Moleküle in orientierenden Medien*

LOEWE-Schwerpunkt, *Soft Control. Mit Polymeren an Grenzflächen Funktionen effizient schalten*

Industrieprojekt mit Merck KGaA im Bereich OLED

Industrieprojekt mit Merck KGaA, *Niedermolekulare Lochleiter*

Industrieprojekt mit der Illing-Stiftung

Prof. Dr. M. Rehahn

DFG SFB 595, *Elektrische Ermüdung in Funktionswerkstoffen*

LOEWE-AdRIA (Adaptronik-Research, Innovation, Application), *adaptives Auto, adaptiver Tilger*

DFG SPP 1369, *Polymer-Festkörper-Kontakte, Segment Density and Coil Dimensions of Polymer Chains Anchored to Solid Surfaces*

Bund/Land, *Excellenzcluster 259, Smart Interfaces – understanding and designing fluid boundaries*

LOEWE-Schwerpunkt, *Soft Control. Mit Polymeren an Grenzflächen Funktionen effizient schalten*

TU Darmstadt MerckLab

TU Darmstadt UPM-Lab

Prof. Dr. R. Schäfer

DFG SPP 1613, *Regenerativ erzeugte Brennstoffe durch lichtgetriebene Wasserspaltung: Aufklärung der Elementarprozesse und Umsetzungsperspektiven auf technologische Konzepte*

DFG, *Statische und dynamische Suszeptibilitäten von isolierten Molekülen und Clustern*

DFG, *Bimetallische Cluster als Modellsysteme für die Legierungsbildung*

Projekt mit Fonds der Chemischen Industrie

Prof. Dr. B. Schmidt

DFG Graduiertenkolleg 1657/1, *Molekulare und zelluläre Reaktionen auf ionisierende Strahlung*

BMBF, *Molecular Diagnosis of Neurodegenerative Disease in the Eye (MINDe)*

Prof. Dr. J.J. Schneider

DFG *Polymer-Festkörper-Kontakte: Probing the Polymer/Solid Interface and Interphase in Mesostuctured 2D-Carbon Nanotube/Polymer Composites: A Combined Study of Experiment and Theory*

DFG SPP 1570, *Poröse Medien mit definierter Porenstruktur in der Verfahrenstechnik – Modellierung, Anwendungen, Synthese*

DFG SPP 1569, *Generation of Multifunctional Inorganic Materials by Molecular Bionics; Genetisch optimierter Tabakmosaikviren als Gerüste für die in vitro Herstellung von Halbleiter-Bio/Metalloxid-nanostrukturierten Architekturen*

DFG, 375/24-1, *Biologically inspired frictional and adhesive artificial surfaces derived from hierarchically ordered patterns of carbon nanotubes*

DFG 375/16-3 und 16-3, *Hybridstrukturen aus Phosphoolivinen des Typs LiMPO_4 mit C-Nanofilamenten für Li-Ionen-Batterien*

DFG, *STROM – Systemintegration von Nanofasern am Beispiel hocheffizienter Mikro-Energiespeicher*
BMBF, *IntenC: TUD-METU Research and Educational Network on Nanomaterials and Nanotechnology for Renewable Resources*

BMBF, *PrintSens, Nanoskalige gedruckte Hybridmaterialien als aktive Funktionselemente in nanostrukturierten Sensorbauteilen*

BMBF, *ELEMENT, Elektromechanische Sensoren mit eindimensionalen Nanoobjekten*

LOEWE Forschungsschwerpunkt, *Sensor Towards Terahertz: Neuartige Technologien für Life Sciences, Prozess- und Umweltmonitoring*

LOEWE Forschungsschwerpunkt, *Elektronenmikroskopie an Funktionsmaterialien*

TU Darmstadt Forschungscluster, *Moderne Materialien und Werkstoffe*

TU Darmstadt-Merck-Lab

EMD Chemicals, Merck-Millipore, Innovation Lab Cambridge

Merck KGaA, experimentelle Studien

Prof. Dr. C.M. Thiele

DFG FOR 934, *Die Bestimmung von Konformation und Konfiguration von organischen Molekülen und Reaktionsintermediaten mit residualen dipolaren Kopplungen*

DFG Emmy Noether Programm, *Struktur-Aktivitätsbeziehungen von biologisch oder katalytisch aktiven Spezies aus der durch NMR bestimmten dreidimensionalen Struktur*

DFG, *β -Peptide als chirale Orientierungsmedien für die NMR-Spektroskopie*

DFG, Heinz Maier-Leibnitz-Preis

EU, ERC Starting Grant, *Structure and dynamics of catalytically active species from Residual Dipolare Couplings*

LOEWE-Schwerpunkt, *Soft Control. Mit Polymeren an Grenzflächen Funktionen effizient schalten*

Prof. Dr. N.F.A. van der Vegt

Bund/Land, Exzellenzcluster 259, *Smart Interfaces – understanding and designing fluid boundaries*

DFG-SFB TRR75: *Tropfdynamische Prozesse unter extremen Umgebungsbedingungen*

DFG-SPP 1420, *Biomimetic Materials Research: Functionality by Hierarchical Structuring of Materials*

DFG SPP 1569, *Generation of multifunctional inorganic materials by molecular bionics, Generation of composites from borides with tuneable electrical conductivities using peptides optimized by genetic engineering, characterization of the bio-solid interactions by modelling and AFM*

DFG SFB Transregio 149, *Multiscale Simulation Methods for Soft Matter Systems*

LOEWE-Schwerpunkt, *Soft Control. Mit Polymeren an Grenzflächen Funktionen effizient schalten*

Industrieprojekt mit Merck KGaA

Prof. Dr. H. Vogel

DFG, *Abbaumechanismen und –kinetiken der Modellbiomassen Cellulose und Lignin bei der Hydrothermal Carbonisierung*

DFG, Graduiertenschule 1070, *Energiewissenschaft und Energietechnik*

BMBF, *Hybrid-Kat - Neuentwicklung von Autoabgaskatalysatoren für Diesel-Hybrid-Fahrzeuge*

BMBF, *REFKAT - Entwicklung von ressourceneffizienten Autoabgaskatalysatoren mit deutlich reduziertem Gehalt an Edelmetallen und Seltenerdmetallen*

FNR (BMELV), *Erarbeitung der Verfahrensgrundlagen zur einstufigen Konversion von alkoholischen Fermenterausträgen zu den entsprechenden reinen Olefinen am Beispiel Biobutanol*

BASF, *Notfallstabilisierung von Acrylmonomeren*

BASF, *Heterogen katalysierte Gasphasenoxidation von Methacrolein zu Methacrylsäure*

Fritz und Margot Faudi-Stiftung, *Reinigung von Biosynthesegas*

Fritz und Margot Faudi-Stiftung, *Hydrothermale Carbonisierung: Ein Verfahren zur energetischen Verwertung von feuchter Biomasse*

Wacker, *Untersuchungen zum Potential von HDK® als Katalysatorträgermaterial*

Zeolyst, *Epoxidation of propylene with H₂O₂*

Zeolyst, *Pyridine and β-picoline synthesis*

21. Transfer von Forschungsleistungen in die Wirtschaft 2012

21.1. Bestehende Firmenausgründungen

Prof. em. Dr. J. Brickmann

MOLCAD GmbH, Darmstadt

Prof. Dr. P. Friedl

CytoTools AG, Darmstadt

DermaTools Biotech GmbH, Darmstadt

CytoPharma GmbH, Darmstadt

21.2. Dienstleistungen und Auftragsforschung

Prof. Dr. M. Biesalski

Polymeranalytik für Industriepartner

Prof. Dr. G. Buntkowsky

Festkörper NMR-Messungen für Industriepartner

Prof. Dr. M. Busch

Diverse Auftragsmessungen für Industriepartner

Verkauf von Erfinderrechten an die Basell Polyolefine GmbH

Prof. Dr. P. Claus

Projekte im Katalyselehrverbund

PD Dr. R. Meusinger

NMR und IR Messungen

Prof. Dr. F. Müller-Plathe

Webseite für DFG Forschungsschwerpunkt 1199

Prof. Dr. H. Vogel

Hochdruckkorrosionsuntersuchungen mit überkritischem Wasser an bereitgestellten Materialproben, Fa. Alstom Power Systems

Prof. Dr. N.F.A. van der Vegt

Diverse Projekte mit Fa. Merck