

Fachbereich Chemie

Forschungsbericht 2008





Impressum

Herausgeber

Der Fachbereich Chemie der TU Darmstadt
Petersenstraße 20, L02|04
64287 Darmstadt
Phone: +49(0)6151/16-3773
Fax: +49(0)6151/16-4073

Redaktion

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

1. Inhaltsverzeichnis

1. Inhaltsverzeichnis.....	i
2. Chronik 2008	3
3. Kurz-Statistik.....	6
4. Arbeitsgruppen-Kurzprofile.....	7
4.1. Clemens-Schöpf-Institut für Organische Chemie und Biochemie.....	7
4.1.1. Biochemie	7
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	9
4.3. Ernst-Berl-Institut für Technische und Makromolekulare Chemie	10
4.3.1. Technische Chemie.....	10
4.3.2. Makromolekulare Chemie.....	11
5. Promotionen und Diplomarbeiten 2008.....	12
5.1. Promotionen	12
5.2. Diplomarbeiten	13
6. Verbleib der Alumni	14
7. Kolloquiumsvorträge	15
7.1. Gesellschaft Deutscher Chemiker – Ortsverband Darmstadt.....	15
7.2. Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie	16
7.3. Clemens-Schöpf-Institut für Organische Chemie und Biochemie.....	18
7.4. Ernst-Berl-Institut für Technische Chemie und Makromolekulare Chemie.....	19
7.5. Deutsches Kunststoffinstitut	20
7.6. Gastredner außerhalb der Kolloquien.....	21
8. Auswärtige wissenschaftliche Vorträge der Arbeitsgruppenmitglieder	22
9. Veröffentlichungen nach Arbeitsgruppen	23
9.1. Anorganische Chemie.....	23
9.2. Physikalische Chemie	26
9.3. Technische Chemie	32
9.4. Makromolekulare Chemie	35
9.5. Organische Chemie	37
9.6. Biochemie	39
10. Patente.....	42
10.1. Neuanmeldungen 2008.....	42
10.2. Bestand an erteilten Patenten und Ersterteilungen 2008	42
11. Herausgebereinigungen.....	43

12. Drittmittel	44
12.1. Ausgewiesene Drittmittel und Verteilung nach Geldgeber-Gruppen.....	44
12.2. Versteckte Drittmittel	44
12.3. Gesamte Drittmittel 2008.....	45
12.4. Neu eingeworbene Drittmittel	45
13. GastwissenschaftlerInnen am Fachbereich Chemie.....	46
14. Extern beschäftigte MitarbeiterInnen des Fachbereichs Chemie	47
15. Preise an Mitglieder des Fachbereichs 2008.....	48
16. Beteiligung an laufenden Verbundprojekten	50
17. Kooperationen.....	53
18. Veranstaltungen	54
19. Außenwirkung.....	56
19.1. Beratungstätigkeit für Firmen, Verbände etc.	57
20. Laufende und geplante Forschungsvorhaben	58
21. Transfer von Forschungsleistungen in die Wirtschaft 2008	61
21.1. Bestehende Firmenausgründungen	61
21.2. Dienstleistungen und Auftragsforschung	61

2. Chronik 2008

Das Jahr 2008 ist rundherum erfolgreich für die Darmstädter Chemie verlaufen. Es wird in Zukunft schwer zu übertreffen sein.

Der Fachbereich tut 2008 alles, um sein Personaldefizit abzubauen. Zum Sommersemester 2008 tritt Professor Christian Hess, vormals Fritz-Haber-Institut Berlin, die Nachfolge von Professor Rolf Schuster in der Physikalischen Chemie an. Er vertritt ab jetzt Oberflächenforschung und -spektroskopie am Fachbereich. Zum 1. September 2008 begrüßt der Fachbereich Professor Markus Biesalski aus zuletzt Freiburg als neuen Kollegen für das Fach Makromolekulare Chemie und Papierchemie (Nachfolge Gruber), welches längere Zeit vakant war. Professor Klaus-Peter Dinse (Physikalische Chemie) geht mit dem Ende des Wintersemesters 2007/2008 in den Ruhestand. Gegen Ende des Jahres sind das Berufungsverfahren und die Verhandlungen soweit abgeschlossen, dass mit Professor Gerd Buntkowsky aus Jena ein Nachfolger bereit steht. Gerd Buntkowsky wird zum Sommersemester 2009 seinen Dienst an der TU Darmstadt antreten. Mit dieser Berufung stellt der Fachbereich Chemie die Weichen zum Aufbau einer eigenen Kompetenz in der Festkörper-NMR. Die Exzellenzinitiative beschert dem Fachbereich Chemie eine zusätzliche Professur innerhalb des Exzellenzclusters Center of Smart Interfaces. Diese Professur *Computational Methods* wird der Physikalischen Chemie zugeordnet. Auch dieses Berufungsverfahren wird 2008 zu Ende gebracht. Professor Nico van der Vegt vom MPI für Polymerforschung Mainz wird am 1. März 2009 seine Arbeit aufnehmen.

Zum außerplanmäßigen Professor für Anorganische Chemie wird am 21. Mai 2008 Dr. Gerhard Pfaff ernannt. Er ist Leiter der Forschung an Pigmenten bei der Firma Merck, seit Juli 1997 in der Chemie für das Fach Anorganische Chemie habilitiert und steuert seit Jahren mit seinen Vorlesungen zum Lehrbetrieb der Chemie bei.

Die anstehende Kernsanierung des Chemiequartiers sorgt für weniger Hektik als im Vorjahr. Das liegt vor allem daran, dass sie wieder einmal hinausgeschoben wird, diesmal auf Anfang 2010. Aus Liquiditäts- und technischen Gründen wird allerdings die Bauabfolge der einzelnen Türme umgedreht. Das erfordert ein neues Rückungsszenario.

Die massiven Bemühungen in der Drittmittelakquise in den vergangenen Jahren tragen Früchte. Im Laufe des Jahres nehmen zahlreiche Verbundprojekte ihre Arbeit auf: DFG Schwerpunktprogramm 1369 „Polymer-Festkörper-Kontakte – Grenzflächen und Interphasen“ (Koordinator Müller-Plathe, weitere Darmstädter Teilnehmer sind Rehahn und Schneider, sowie Drossel und Stühn aus dem FB Physik); DFG-Forschergruppen 934 „Relative and absolute configurations of dissolved molecules by NMR-spectroscopy in orienting media“ (Koordinator Reggelin, weitere Darmstädter Teilnehmerin ist Christina Thiele mit eigener Emmy-Noether-Gruppe); im BMBF-TÜBITAK Austauschprogramm „Research and Educational Network on Nanomaterials and Nanotechnology for Renewable Resources“ zwischen der TU Chemie und der Middle-East Technical University (Koordinator Schneider) reist eine Darmstädter Delegation im November nach Ankara, der Gegenbesuch wird im Frühjahr 2009 stattfinden; am 7.7.2008

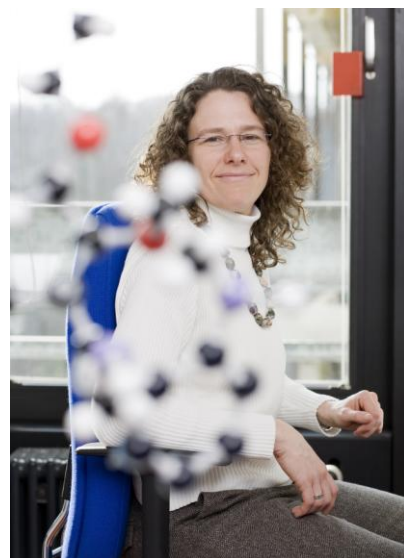


Foto: Karin Binner

Dr. Christina M. Thiele

startet das BMBF Verbundprojekt „Kompetenznetzwerk Degenerative Demenzen“ (Boris Schmidt), am 1.10.2008 und 1.11.2008 die EU-Verbundprojekte NeuroGSK3 (Boris Schmidt) und Nanomodel (Müller-Plathe). Daneben sind zahlreiche Einzelprojektanträge und – trotz beginnender Wirtschaftskrise – Einwerbungen von Industriekooperationen erfolgreich.

Die Hochschullehrer treffen sich nun schon im zweiten Jahr zu Forschungsklausuren in Michelstadt, jeweils am Anfang von Sommer- und Wintersemester.

Der Ausgang der Landtagswahl in Hessen (27.01.2008) ergibt als eine der wenigen politischen Entscheidungen während der einjährigen Hängepartie auch die Wiederabschaffung der Studiengebühren an hessischen Universitäten. Das Land sagt dafür Ausgleichsmittel zu. Vielleicht ist die massive Zunahme der Studienanfängerzahlen von 187 im Jahr 2007 auf 242 im Jahr 2008 auch auf das Wegfallen der Studiengebühren zurückzuführen. Die erneut gestiegene Nachfrage für das Studienfach Chemie einschließlich Lehramt wird jedoch als äußerst erfreulich angesehen. Für die weitere Zunahme sorgt der neu eingerichtete Studiengang Biomolecular Engineering, dessen erste 20 Studierende ihr Studium im Wintersemester 2008/2009 aufnehmen.



Besonders erfolgreich ist der wissenschaftliche Nachwuchs des Fachbereichs. Das zeigt sich nicht nur an den zahlreichen gewonnenen Forschungspreisen, von denen der Preis der Arbeitsgemeinschaft Deutscher Universitätsprofessorinnen und -professoren für Chemie (ADUC) für Frau Dr. Christina Thiele (Arbeitsgruppe Reggelin, Verleihung am 31.3.2008) und der Kurt-Ruths-Preis für Dr. Philip Kampe (Arbeitsgruppe Vogel, 20.02.2008) nur die prominentesten Beispiele sind.

Auch Erstrufe ereilen den Nachwuchs der Chemie. Frau Dr. Paola Carbone (Humboldt-Stipendiatin in der Arbeitsgruppe Müller-Plathe) wird am 1. September 2008 Lecturer an der University of Manchester, England, und Dr. Sudip Roy (Arbeitsgruppe Müller-Plathe) wird zum Jahresende Associate Professor am Indian Institute of Science, Education and Research in Pune, Indien. Dr. Harald Pasch, Abteilungsleiter im Deutschen Kunststoffinstitut und an der TU Darmstadt für Makromolekulare Chemie habilitiert, folgt 2008 einem Ruf an die Universität Stellenbosch, Südafrika.

Prof. Dr. Siegfried Neumann, seit 1998 Honorarprofessor für Biochemie am Fachbereich Chemie, erhält am 12. Dezember 2008 das Bundesverdienstkreuz 1. Klasse des Verdienstordens der Bundesrepublik Deutschland. Die Auszeichnung würdigt seine maßgebliche Gestaltung der deutschen Forschungslandschaft auf den Gebieten Biotechnologie und Biomedizin.



Foto: Stefanie Heil

Prof. Dr. Neumann

Am 5. September 2008 wird das am Fachbereich Chemie ansässige Merck-TU Darmstadt Juniorlabor eröffnet. In dieser deutschlandweit einzigen von Industrie und Hochschule gemeinsam getragenen Einrichtung führen Schüler unter erfahrener Anleitung chemische Experimente durch.



Am 12. September 2008 findet am Fachbereich ein Symposium zum 60. Geburtstag von Honorarprofessor Prof. Dr. Markwart Kunz statt.

Helmut Witte (1909 – 2008)

studierte Physik in Braunschweig, München und Göttingen. 1938 habilitierte er sich und nahm 1939 bei der Firma C.H.F. Müller AG ("Röntgenmüller") eine Stelle in Berlin an. 1943 wechselte er ans Institut für Anorganische und Physikalische Chemie (später kam die Trennung von AC und PC in zwei Institute; heute das Eduard-Zintl-Institut) der Technischen Hochschule Darmstadt. 1949 erhielt er dort das Extraordinariat für chemische und physikalische Röntgenkunde. Witte wurde dann 1954 als Nachfolger von W. Jost auf den Lehrstuhl für Physikalische Chemie berufen. Helmut Witte war einer der Pioniere auf dem Gebiet der Röntgen-Strukturanalyse und untersuchte den Zusammenhang zwischen Struktur, Bindung und Eigenschaften von Kristallen. 1960 wählte der Große Senat der TH Darmstadt (heute TUD) Helmut Witte zum Rektor. 1962-65 gehörte er dem Präsidium der Westdeutschen Rektorenkonferenz an, seit 1965 dem Senat der DFG, deren Vizepräsident er ab 1969 war. Helmut Witte war zudem von 1961-70 Herausgeber der Berichte der Deutschen Bunsen-Gesellschaft (DBG) für Physikalische Chemie, 1967 und 68 Erster Vorsitzender der DBG und seit 1978 deren Ehrenmitglied.
(Peter C. Schmidt)



Am 26. Juni 2008 stirbt, fast 99jährig, Helmut Witte, emeritierter Professor für Physikalische Chemie, siehe nebenstehende Kurzbiographie. Bei seiner Beisetzung auf dem Friedhof DA-Eberstadt sprechen sein Nachfolger Professor Jürgen Brickmann für die Chemie und Vizepräsidentin Frau Professor Petra Gehring für das Präsidium.

(Florian Müller-Plathe, Prodekan)

3. Kurz-Statistik

Menschen

Am 31.12.2008 waren in den Arbeitsgruppen am Fachbereich Chemie und im Chemie-bezogenen Teil des Deutschen Kunststoffinstituts 318 Personen tätig. Von diesen waren

17	Professoren
5	emeritierte/pensionierte Professoren (aktiv)
15	Wissenschaftler mit Leitungsfunktion
123	Doktoranden
32	Post-Doktoranden
44	Administrativ-Technische Mitarbeiter
96	Frauen
32	international (Hochschulabschluss im Ausland)
6	Stipendiaten (Heisenberg, Humboldt, DAAD, Stiftungen, andere Quellen)
120	nicht durch TU-Stellen (Landesstellen) finanziert

Veröffentlichungen

Am Fachbereich und DKI entstanden 2008 192 neue Veröffentlichungen, davon 151 in begutachteten Fachzeitschriften, sowie 10 Patente. Ein Highlight ist eine Veröffentlichung in Nature von Prof. Boris Schmidt. Die Veröffentlichungen der Professoren und Gruppenleiter wurden 2008 insgesamt 3686mal in der Literatur zitiert. Der mittlere H-Index der aktiven Professoren betrug 18. Einzelne Mitglieder des Fachbereichs wirkten als Editoren oder Board Members bei 16 Zeitschriften.

Drittmittel (ohne Deutsches Kunststoffinstitut)

Im Jahr liefen 94 Drittmittelprojekte (mit jeweils einem Personenjahr oder mehr Gesamtdauer). Mitglieder des Fachbereichs Chemie waren an 38 laufenden Verbundprojekten (davon 15 DFG-Sonderforschungsbereiche, Schwerpunkte, Graduiertenkollegs, 13 BMBF-Verbünde, 4 EU-Verbünde, 2 LOEWE und 4 weitere Verbünde) beteiligt. Im Jahr 2008 wurden Zusagen (Zuwendungsbescheide, Verträge) über etwa 5,2 Mio. € neu akquiriert.

Vorträge

82 externe Sprecher haben in der Chemie oder am DKI vorgetragen, davon 62 in den Kolloquien der Institute oder der Gesellschaft Deutscher Chemiker, Ortsverband Darmstadt. Umgekehrt haben Mitglieder des Fachbereichs ca. 200 Vorträge auswärts gehalten.

Konferenzen, Workshops, Sommerschulen

Mitglieder des Fachbereichs haben 2008 selbst 39 Veranstaltungen organisiert oder mitorganisiert.

Wissenschaftlicher Nachwuchs

2008 wurden 53 Diplomarbeiten und 19 Promotionen abgeschlossen.

4. Arbeitsgruppen-Kurzprofile

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

4.1.1. Biochemie

Prof. Dr. Norbert A. Dencher

Forschungsschwerpunkt der Arbeitsgruppe Physikalische Biochemie ist die Untersuchung der Struktur und Funktion von biologischen Membranen und Proteinen sowie die biologische Energieumwandlung an Membranen. Das besondere Interesse liegt in der Aufklärung der Struktur-Funktionsbeziehung von Protonen-ATP-Synthasen und von Atmungskettensuperkomplexen verschiedener Organismen. Mittels Neutronenstreuung erfolgt die Strukturanalyse von Membranen und Membranproteinen, einschließlich der Lokalisation von funktionell wichtigen Wassermolekülen. Die Dynamik von Membranen und Wasser wird charakterisiert mittels quasielastischer Neutronenstreuung im Zeitfenster von Femto-Nanosekunden. Ein weiterer Schwerpunkt der Forschung bildet die Altersforschung: Vergleichende Proteomanalyse junger und älterer Organismen, bzw. deren Mitochondrien aus verschiedenen Organen. Darüber hinaus werden molekulare Prozesse der Alzheimer Demenz und die Strahlenwirkung auf Zellen untersucht.

www.biochemie.tu-darmstadt.de/Dencher

Prof. Dr. Peter Friedl

Im Fokus der Arbeitsgruppe Biotechnologie und Zellkulturtechnik stehen Aspekte der mechanosensitiven Regulation von vaskulären Endothelzellen und die Wirkstoffentwicklung gegen vaskuläre Erkrankungen. Darüber hinaus werden Transfektionstechniken und Expressionsvektoren entwickelt sowie Primärzellen immortalisiert.

Prof. Dr. Harald Kolmar

Das wissenschaftliche Hauptaugenmerk liegt auf dem Entwurf und der biologischen Synthese von Peptiden und Proteinen mit diagnostischem und therapeutischem Potenzial, sowie auf der Synthese von Enzymen für den Einsatz in der weißen Biotechnologie. Dabei kommen rationale-Protein-Design Verfahren ebenso zum Einsatz wie Hochdurchsatzmethoden der evolutiven Biotechnologie.

www.chemie.tu-darmstadt.de/kolmar

4.1.2. Organische Chemie

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 mit Hilfe der kernmagnetischen Resonanzspektroskopie (NMR) durch.

<http://www.oc.chemie.tu-darmstadt.de>

Prof. Dr. Michael Reggelin

Die Forschungsfelder liegen in der stöchiometrischen und katalytischen Anwendung von optisch aktiven Sulfoximinen, dem Einsatz von helikal-chiralen Polymeren in der Übergangsmetall- und der Organokatalyse, der Verwendung von helikal-chiralen Polymeren als neuartige Alignment Medien zur Bestimmung anisotroper NMR-Parameter und der Totalsynthese von FAST-BLUE und Cylindricinen.

deephought.oc.chemie.tu-darmstadt.de

Prof. Dr. Boris Schmidt

Der Forschungsschwerpunkt liegt in der Medizinalchemie neurodegenerativer Erkrankungen, wie Morbus Alzheimer, Morbus Parkinson, Creutzfeld-Jacob und BSE. Inhibitoren für Protein-Protein-Interaktionen werden identifiziert und entwickelt, beispielsweise für β -Faltblatt-Aggregationen von Amyloid beta, Tau und Prionen sowie für Aspartylproteasen (Alzheimer Demenz) und das 20 S Proteasom.

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

Dr. Christina M. Thiele - Emmy-Noether-Nachwuchsgruppe

In der Arbeitsgruppe werden die dreidimensionalen Strukturen organischer Verbindungen – Bestimmung von Konformation und Konfiguration biologisch oder katalytisch aktive Spezies - mit Hilfe der NMR-Spektroskopie untersucht. Zu diesem Zweck werden neuartige anisotrope NMR-Parameter wie die residuale dipolare Kopplung und damit assoziierte Methoden angewandt. Die Anwendungsfelder reichen von der Bestimmung der relativen Konfiguration bis hin zur Untersuchung von Struktur und Dynamik katalytisch aktiver Spezies.

deephought.oc.chemie.tu-darmstadt.de/cmt_htdocs/

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

4.2.1. Anorganische Chemie

Prof. Dr. Barbara Albert

In der Arbeitsgruppe Anorganische Festkörperchemie werden neue, anorganische Substanzen und Materialien bei Synthesetemperaturen zwischen -100 und 3000 °C gesucht und bezüglich ihrer Struktur und Eigenschaften charakterisiert. Zahlreiche Analysemethoden wie die Röntgenstrukturanalyse und die Elektronenmikroskopie kommen zum Einsatz. DFT-Rechnungen komplettieren das Methodenrepertoire auf dem Weg zu einem vertieften Verständnis der Korrelation von (elektronischer) Struktur und (Material-) Eigenschaften.

www.chemie.tu-darmstadt.de/albert

Prof. Dr. Herbert Plenio

Die Forschungsaktivitäten der Arbeitsgruppe liegen im Bereich der homogenen Katalyse und der Organometallchemie. Insbesondere werden Pd-vermittelte Kreuzkupplungsreaktionen, die Ru-vermittelte Olefin-Metathese sowie die Entwicklung von Fluoreszenzfarbstoff-basierten Methoden zur mechanistischen Aufklärung katalytischer Elementarschritte erforscht.

www.chemie.tu-darmstadt.de/plenio

Prof. Dr. Jörg J. Schneider

Im Fokus der Forschung stehen die meso- und nanoskopische Chemie, die anorganische Materialchemie sowie Organometallchemie

www1.tu-darmstadt.de/fb/ch/Fachgebiete/AC/AKSchneider

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

Auf der Grundlage der bisher gesammelten experimentellen 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. Daneben 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. em. 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. i.R. Dr. Klaus-Peter Dinse

Mit magnetischer Resonanzspektroskopie werden die Eigenschaften von nanostrukturierten Festkörpern untersucht. Im Vordergrund stehen die Ladungstransporteigenschaften von Kohlenstoffnanoröhrchen und deren Modifikation durch Innendotierung mit Spinsonden. Weiterhin werden die Eigenschaften von Katalysatoren durch Bestimmung der Oxidationsstufen der aktiven Zentren untersucht.

Prof. i.R. Dr. Wolfgang Haase

Grundlagenuntersuchung und Anwendung von Flüssig-Kristallen (liquid crystals: LCs), deren Eigenschaften im Mikrowellengebiet, von Metallomesogenen und Nanopartikeln in LCs. Molekularer Magnetismus: Messungen im DC (2-500 K) und AC (2-300 K, 0-5 T), Untersuchungen des magnetischen Zirkulardichroismus (0-9 T, 2-300 K) und theoretische Berechnungen zu high-spin Co(II), Spin Crossover von Komplexverbindungen und photoempfindlichen Polymeren.

www1.tu-darmstadt.de/fb/ch/Fachgebiete/PC/kondmat/start_en.html

Prof. Dr. Christian Hess

Die Forschungsfelder liegen in der Oberflächenchemie von Nanomaterialien, heterogenen Katalyse, Sensorik, Batterieforschung und *in situ*-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-Ionenbatterien zu untersuchen.

www1.tu-darmstadt.de/fb/ch/Fachgebiete/PC/AKHess

PD Dr. Stefan M. Kast

Mit theoretischen und computergestützten Modellen werden komplexe Systeme auf atomarer Ebene untersucht. Die methodischen Entwicklungen (Kombinationen von Moleküldynamik-Simulationen, quantenchemischen Rechnungen und statistisch-mechanischen Integralgleichungstheorien) finden Anwendung auf Membranproteine, Ionenkanäle und Protein-Ligand-Komplexen.

www.keychem.de

Prof. Dr. Florian Müller-Plathe

Die Arbeitsgruppe Theoretische Physikalische Chemie führt Computersimulationen von Polymeren, weichen Materialien, Nanokompositen, biologischen Systemen sowie Grenzflächen und Fluiden durch. Dazu werden Modelle/Kraftfelder, neue Simulationsmethoden und Software entwickelt, insbesondere im Bereich der Multiskalensimulation, Grenzflächen und Transportkoeffizienten.

www.theo.chemie.tu-darmstadt.de

Prof. Dr. Rolf Schäfer

Das Forschungsfeld liegt in der Untersuchung von Materie im Übergangsbereich, zwischen isolierten Atomen und anorganischen Festkörpern. Von Interesse sind die dielektrischen, optischen, thermochemischen und katalytischen Eigenschaften von kleinen Clustern.

www.chemie.tu-darmstadt.de/schaefer

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 zu Stabilität von Reaktionsmischungen bei bis zu 4000 bar und 400 °C ausgeführt.

www.ct.chemie.tu-darmstadt.de/ak_busch

Prof. Dr. Peter Claus

Das Hauptarbeitsgebiet ist die Heterogene Katalyse und die wissensbasierte (rationale) Katalysatorentwicklung. 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 Umsetzung nachwachsender Rohstoffe.

www.ct.chemie.tu-darmstadt.de/ak_claus

Prof. Dr. Herbert Vogel

Die Themenfelder umfassen die selektive Defunktionalisierung von nachwachsenden Rohstoffen mit Hilfe von Katalyse und Green Solvents (bevorzugt nah- und überkritisches Wasser), das rationale Katalysatordesign mittels der *in situ* Methoden DRIFTS, TG/DTA-MS und der instationären Kinetikmethoden wie temperatur- und konzentrationsprogrammierten Reaktionen sowie Isotopenaustauschmethoden.

www.ct.chemie.tu-darmstadt.de/ak_vogel

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.

4.3.2. Makromolekulare Chemie

Prof. Dr. Markus Biesalski

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit der Entwicklung von funktionalen Polymeren, biosynthetischen Polymerhybriden und maßgeschneiderten Oberflächen mit Hilfe von Polymerfilmen. Die Expertise reicht hierbei von Grenzflächenfunktionalisierung biologischer/biosynthetischer Materialien bis zur Modifikation von anorganischen und organischen Substratoberflächen. Das Interesse gilt insbesondere der Anwendung in biomedizinischen/biosensorischen sowie technologischen (Papiertechnologie, Entwicklung von funktionalen Papieren) Bereichen.

www.chemie.tu-darmstadt.de/map/index/people/profdrbiesalski

Prof. Dr. Matthias Rehahn

Der Forschungsfokus der Arbeitsgruppe am Fachbereich Chemie liegt auf der Entwicklung funktionaler Polymere (elektrisch leitend, Ionen leitend) für die Optoelektronik und in der Kontrolle der Mikromorphologie polymerer Werkstoffe (insbes. Block-Copolymere) sowie der definierten Oberflächenanbindung von Polymeren, dem Grafting.

www.makromolekulare-chemie.de/index.php?page=userdetails&e_idx=19&PHPSESSID

Deutsches Kunststoffinstitut (DKI)

Die Arbeiten am DKI überspannen das gesamte Polymer-Feld von der Synthese über die Charakterisierung, Verarbeitung, Modellierung, Simulation und Prüfung von Polymeren. Schwerpunkt hierbei ist anwendungsorientierte Grundlagenforschung vor allem für den industriellen Mittelstand. Inhaltliche Spezialitäten sind Nanocomposites, kombinatorische Materialentwicklung, Inline-Testverfahren, Crash-Modellierung und Alterungsverhalten.

www.dki.tu-darmstadt.de

5. Promotionen und Diplomarbeiten 2008

Zeitraum 01.01.2008 – 31.12.2008

5.1. Promotionen

Gesamt: 19 Abschlüsse (Frauen: 6, Männer: 13)

Chen, Xiaoyu, *Multiscale simulation of polymers under shear*, Prof. Müller-Plathe (PC), Juli 2008

Corzilius, Björn, *Electromagnetic properties of single-walled carbon nanotubes investigated by microwave absorption*, Prof. Dinse (PC), Juni 2008, Abschluss "mit Auszeichnung"

Demirel, Séval, *Flüssigphasenoxidation von Glycerol an Gold-Katalysatoren*, Prof. Claus (TC), Januar 2008

Fleckenstein, Christoph, *Entwicklung und Evaluation von cataCXium[®] F – Phosphinliganden für palladiumvermittelte Kreuzkupplungsreaktionen*, Prof. Plenio (AC), Oktober 2008, Abschluss "mit Auszeichnung"

Frotscher, Michael, *Struktur und Charakterisierung von borreichen Boriden und Übergangsmetallboriden*, Prof. Albert (AC), Juni 2008

Kühl, Jochen, *Synthese und Verwendung chiraler Sulfoximinauxiliare bei der Darstellung von Azabicyclo[3.3.0]octan-Peptidmimetika*, Prof. Reggelin (OC), Januar 2008

Langecker, Jens, *Synthese und Charakterisierung fluorenbasierter Komplexpolymerer zur Anwendung in organischen Leuchtdioden*, Prof. Rehahn (MC), Juni 2008

Laubach, Sonja, *Untersuchung der Kristallstruktur, der Elektronenstruktur und des Lumineszenzverhaltens des blau-grünen Leuchtstoffs $Sr_6B(PO_4)_4PO_4:Eu$* , Prof. P.C. Schmidt (PC), Juni 2008

Laubach, Stefan, *Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Elektronenstruktur der Interkalationsverbindungen NaV_2O_5 , $LiCoO_2$ und $LiCo_xNi_{1-x}CoO_2$* , Prof. P.C. Schmidt (PC), November 2008

Lehr, Vanessa, *Dehydratisierung von Glycerol zu Acrolein in alternativen Lösemitteln unter Druck und hohen Temperaturen*, Prof. Vogel (TC), November 2008

Raust, Jaques, *Development of Multidimensional Chromatography for Complex (meth)acrylate-based Copolymers used in Cosmetic Applications*, Prof. Rehahn (MC), Dezember 2008

Schäfer, Sascha, *Der Stark-Effekt als Werkzeug zur Strukturaufklärung isolierter Cluster*, Prof. Schäfer (PC), April 2008, Abschluss "mit Auszeichnung"

Schwalm, Thorsten, *Studien zum Mechanismus der Gilch-Polymerisation und zum Ermüdungsverhalten von Poly(p-phenylen-vinyl)en (PPVs) in organischen lichtemittierenden Dioden (OLEDs)*, Prof. Rehahn (MC), April 2008

Spahn, Peter, *Kolloidale Kristalle aus monodispersen Silika-Polymer Hybridpartikeln*, Prof. Rehahn (MC), April 2008

Steffan, Martin, *Citralhydrierung in Gegenwart ionischer Flüssigkeiten*, Prof. Claus (TC), Dezember 2008

Suhai, Tina, *Funktionelle und strukturelle Charakterisierung von F_0F_1 -ATP-Synthasen aus Cyanobakterien und Grünalgen*, Prof. Dencher (BC), November 2008

Turra, Mike, *Aufbau und Erprobung einer Molekularstrahlapparatur für die Präparation, Massenselektion, Deposition und Oberflächenstreuung von reinen und legierten Blei- und Zinnclusterkationen*, Prof. Schäfer (PC), Juli 2008

Viel, Nadja *Untersuchungen zum Adsorptionsverhalten von polymeren Papieradditiven und deren Einfluss auf die Biofilmbildung*, Prof. Gruber (MC), Juni 2008

Weyhardt, Holger, *Synthese und Untersuchung konjugierter metallorganischer Hybridpolymere durch ADMET-Polymerisation*, Prof. Plenio (AC), Januar 2008

5.2. Diplomarbeiten:

Im Jahr 2008 wurden insgesamt 53 Diplomarbeiten abgeschlossen (Frauen: 18, Männer: 35), die Zahl verteilt sich folgendermaßen auf die einzelnen Fachgebiete:

Anorganische Chemie:	7
Biochemie:	10
Makromolekulare Chemie:	11
Organische Chemie:	6
Physikalische Chemie:	5
Technische Chemie:	14

6. Verbleib der Alumni

Von 25 erfassten Alumni (mehrheitlich Doktoranden, aber auch Post-Docs, Stipendiaten, etc.) fanden nach Verlassen der TU Darmstadt eine erste Beschäftigung in

Industrie	10
Wirtschaft, nicht Industrie	2
Akadem. Forschung	8
Verwaltung, Behörden	2
Elternzeit/arbeitslos/unbekannt	3

7. Kolloquiumsvorträge

7.1. Gesellschaft Deutscher Chemiker – Ortsverband Darmstadt

15. Januar 2008

Prof. Dr. Thomas Carell, Fakultät für Chemie und Pharmazie, Ludwig-Maximilians-Universität München

Wie unsere Zellen ihre Gene intakt halten

29. Januar 2008

Prof. Dr. Andreas Hirsch, Lehrstuhl für Organische Chemie II, Universität Erlangen-Nürnberg

Kohlenstoffreiche Funktionsmaterialien: Synthese und Supramolekulare Organisation.

15. April 2008

Prof. Dr. Ulrich W. Suter, Institut für Polymere, ETH Zürich

Kunststoff – das natürliche Material

29. April 2008

Dr. Jürgen Gieshoff, Umicore AG, Hanau

Abgasreinigung für Kraftfahrzeuge

13. Mai 2008

Prof. Dr. Adelheid Godt, Organische Chemie, Universität Bielefeld

Oligo(phenylenethinylene) als Testverbindungen für Methoden zur Abstands(verteilungs)bestimmung

27. Mai 2008

Prof. Dr. Ursula Klein, Max-Planck-Institut für Wissenschaftsgeschichte, Berlin

Zur Geschichte chemischer Laboratorien

10. Juni 2008

Prof. Dr. Werner M. Nau, Organische Chemie, Jacobs University Bremen

Cucurbiturile: Makrozyklische Containermoleküle mit vielfältigen Anwendungen

24. Juni 2008

Prof. Dr. Christian Hess, Physikalische Chemie, TU Darmstadt

Synthese, Charakterisierung und Anwendung nanostrukturierter funktionalisierter Materialien für die Katalyse.

28. Oktober 2008

PD Dr. Andreas Hartwig, Fraunhofer Institut für Fertigungstechnik und angewandte Materialforschung (IFAM) Bremen

Kleben – Nanotechnologie aus Tradition

25. November 2008

Prof. Dr. François Diederich, Laboratorium für Organische Chemie, ETH Zürich

Molekulare Erkennungsstudien mit biologischen Rezeptoren: Strukturbasierte Wirkstoffentwicklung

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

09. Januar 08

Prof. Dr. Bernd Speiser, Institut für Organische Chemie, Eberhard Karls Universität Tübingen
Elektrochemie in kleinen Dimensionen - Kombinatorische Mikroelektrochemie und redoxaktive Nanopartikel

16. Januar 08

Prof. Dr. Claus Feldmann, Institut für Anorganische Chemie Universität Karlsruhe (TH)
Nanoskalige Funktionsmaterialien - Synthese, Charakterisierung und Anwendung

30. Januar 08

Prof. Dr. Lothar Weber, Anorganische Chemie, Fakultät für Chemie, Universität Bielefeld
1,3,2-Diazaborole: Neuartige Bausteine in photolumineszierenden Systemen

9. April 2008

Dr. Gerhard Pfaff, Fa. Merck KGaA, Forschung Pigmente, Darmstadt
Effektpigmente – aktueller Stand und neue Entwicklungen

16. April 2008

Prof. Dr. Martina Havenith-Newen, Physikalische Chemie II, Ruhr-Universität Bochum
Der „THz-Tanz“ des Wassers mit den Biomolekülen

7. Mai 2008

Prof. Dr. Ulrich Zenneck, Institut für Anorganische Chemie Universität Erlangen-Nürnberg
Precursorkomplexdesign für die MOCVD-Abscheidung dünner Metallfilme – Lassen sich Materialeigenschaften durch Komplexstrukturen steuern?

14. Mai 2008

Prof. Dr. Werner Köhler, Physikalische Chemie Universität Bayreuth
The Soret effect: why and how molecules move in a temperature gradient

21. Mai 2008

Prof. Dr. Werner Mader, Anorganische Materialforschung, Institut für Anorganische Chemie, Universität Bonn
Neues über Domänen- und Nanostrukturen mit Zinkoxid

4. Juni 2008

Prof. Dr. Petra Becker-Bohatý, Institut für Kristallographie, Universität Köln
New crystalline materials for nonlinear optics

11. Juni 2008

Univ. Prof. Mag. Dr. Oliver Diwald, Institut für Materialchemie, Technische Universität Wien
Spectroscopy of morphologically well-defined oxide nanocrystals

18. Juni 2008

Dr. Oliver Trapp, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr

Brückenschlag von Synthese und Analytik - Neue Strategien zum Hochdurchsatzscreening von Katalysatoren

4. Juli 2008

Prof. Dr. Roland Winter, Physikalische Chemie I – Biophysikalische Chemie, TU Dortmund

Konformation und Freie Energie-Landschaft biomolekularer Systeme unter extremen Zustandsbedingungen - vom Ursprung des Lebens bis zur Alzheimer-Krankheit

29. Oktober 2008

Prof. Dr. Rüdiger Iden, Abt. Polymerphysik, Kunststofflabor der BASF AG, Ludwigshafen

Nanotechnology Reshaping the Plastics Industry?

05. November 2008

Dr. Kerstin Schierle-Arndt, Anorganik und Neue Materialien, BASF AG, Ludwigshafen

Thermoelektrik und Co. – Beiträge der Anorganischen Materialforschung zur effizienten Nutzung von Energie

12. November 2008

Prof. Dr. Bernd Abel, Spektroskopie und photochemische Kinetik, MPI für biophysik. Chemie, Göttingen

Ultraschnelle ESCA-Spektroskopie an Flüssigkeitsgrenzflächen

19. November 2008

Prof. Dr. Anthony K. Cheetham, Material Science & Metallurgy, University of Cambridge, UK

Recent Developments in Hybrid Inorganic-Organic Framework Materials

03. Dezember 2008

Prof. Dr. Max Holthausen, Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Johann W. Goethe-Universität Frankfurt

Bioanorganische Modelle für zweikernige Kupferproteine: Struktur und Oxidationschemie aus quantenchemischer Sicht

10. Dezember 2008

Prof. Dr. Alfons Geiger, Lehrstuhl für Physikalische Chemie, Technische Universität Dortmund

What we have learned from simulations of water in exotic states

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

07. Januar 2008

Dr. Martin Klußmann, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung Mühlheim/Ruhr

Von mechanistischen Studien organokatalytischer Reaktionen zu Spekulationen über den Ursprung der Homochiralität

07. April 2008

Dr. Thomas Hauß, Hahn-Meitner-Institut Berlin

Untersuchungen zur Struktur und Dynamik von biologischen Membranen mittels Neutronenstreuung

02. Juni 2008

Prof. Dr. Markus Kalesse, Institut für Organische Chemie, Universität Hannover

Naturstoffe als Leitstrukturen

16. Juni 2008

Dr. Stephanie Grond, Institut für Organische und Biomolekulare Chemie

Neue Naturstoffstrukturen – Innovation für Chemie und Biologie

16. Oktober 2008

Prof. Dr. Robert M. Tanguay, Université Laval, Québec, Canada

Drosophila melanogaster as a model system for the study of ageing and protein folding diseases as well as a screening tool for drug discovery and assessment

20. Oktober 2008

Dr. Henk-Jan Joosten, WageningenUR, Netherlands

3DM: predicting the effects of mutations using (super)family protein data

17. November 2008

Dr. Katja Arndt, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Semi-rationales Design und Selektion von Peptiden zur Inhibition onkogener Protein-Protein Wechselwirkungen

01. Dezember 2008

Prof. Dr. Reinhard Brückner, Institut für Organische und Biochemie, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

γ-Lactone: Zielstrukturen und Schlüssel-Intermediate von Naturstoffsynthesen

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

8. Januar 2008

Dipl.-Ing. Jens Hohmeyer, TUD

Untersuchung von Metall/Träger-Katalysatoren mittels Adsorptionsmikrokalorimetrie und DIFTS

22. Januar 2008

Dr. Stephan Wellach, Grace GmbH, Worms

Zeolithe

08. April 2008

Dipl.-Ing. C. Schmitt, Materialwissenschaften, TUD

Mo/W und V/W Festkörpersysteme

06. Mai 2008

Dipl.-Ing. P. Kern und Frau Dipl.-Ing. M. Klimczak, Technische Chemie II, TUD

Chemische Desaktivierung von Autoabgaskatalysatoren

20. Mai 2008

Frau Dr. B. Huckestein, BASF Ludwigshafen

Kunststoffe & Umwelt

03. Juni 2008

Frau Dr. A. Brückner, Leibnitz-Institut für Katalyse e.V. an der Uni Rostock, Berlin.

In-situ EPR gekoppelt mit UV/Rahmen

17. Juni 2008

Dipl.-Ing. M. Steffan, Technische Chemie II, TUD

Flüssigphasenhydrierung in organischen Lösungsmitteln und ionischen Flüssigkeiten

01. Juli 2008

Frau Dipl.- Ing. S. Ungermann, Technische Chemie I, TUD

Katalytische Filter

04. Juli 2008

Alarich-Weiss-Preisverleihung, Vortragender Prof. Dr. Roland Winter, Physikalische Chemie I – Biophysikalische Chemie, TU Dortmund

Konformation und Freie Energie-Landschaft biomolekularer Systeme unter extremen Zustandsbedingungen - vom Ursprung des Lebens bis zur Alzheimer-Krankheit

21. Oktober 2008

Dr. Neuenfeld, Merck KGaA

Thermische Sicherheit chemischer Prozesse

04. November 2008

Prof. Dr. N. Roesch, Technische Universität München

Aktivierung von Wasserstoff an getragenen Metallclustern: Beiträge der Theoretischen Chemie

18. November 2008

Prof. Sabine Beuermann, Universität Potsdam

Vinylidenfluoridpolymere aus Reaktionen in überkritischem Kohlendioxid

16. Dezember 2008

Prof. C. Barner-Kowollik

Exploring New Avenues for the Synthesis of Well-Defined Polymeric Materials

7.5. Deutsches Kunststoffinstitut

10. Januar 2008

Prof. Dr. H. Ritter, Heinrich-Heine-Universität, Düsseldorf

Neues über Cyclodextrine in der Polymerchemie

17. Januar 2008

Prof. Dr. U. Wagenknecht, IPF Dresden

Polymer double layered hydroxide composites

24. Januar 2008

Dr. M. Lake, SKZ – TeConA GmbH, Würzburg

Die Zukunft der Kunststoffverarbeitung in Europa – Bedeutung und Nutzen von Kooperation am globalen Markt

31. Januar 2008

Dr. W.-D. Hergeth, Wacker Polymer Systems GmbH & Co.KG, Burghausen

Prozessverfolgung bei industriellen Polymerisationen

08. Mai 2008

Prof. Dr. Karl Schulte, Technische Universität Harburg

Beitrag von Nanopartikeln zur Verbesserung der Eigenschaften von Polymeren

15. Mai 2008

Prof. Dr. Diethelm Johannsmann, Technische Universität Clausthal

Anwendungen von Ultraschall-Resonatoren in der Polymer-Charakterisierung

29. Mai 2008

Dr. Klaas Remerie, SABIC Europe BV, Geleen, Niederlande

The use of cutting edge analytical techniques as a material development tool within Polyolefin research

05. Juni 2008

Dipl.-Ing. Frank Fischer, Universität Bayreuth

Zur Korrelation von Zellstruktur und Endgebrauchseigenschaften bei Polymerschäumen

26. Juni 2008

Dr. Rüdiger Baunemann, PlasticsEurope Deutschland e.V., Frankfurt am Main

Die Kunststoffindustrie und REACH

03. Juli 2008

Dr. Frank-Olaf Maeling, BASF SE, Ludwigshafen

Raffinerie-Chemikalien der BASF

13. November 2008

Dr. Can Kreuz, ZBT Zentrum für Brennstoffzellentechnik, Duisburg

Spritzgießtechnische Herstellung von graphitischen Bipolarplatten für PEM-Brennstoffzellen

27. November 2008

Prof. Dr.-Ing. Thomas Seul, Fachhochschule Schmalkalden

Kunststoff trifft Medizintechnik

11. Dezember 2008

Prof. Dr. Michael Wübbenhorst, K.U. Leuven, Belgien

Dielectric probes: powerful tools for the study of glass transition dynamics in apolar polymers in bulk and ultra-thin film geometry

7.6. Gastredner außerhalb der Kolloquien

AG Prof. Busch (gesamt 2)

Dr. Humberto Palza, Universität Karlsruhe, Institut für Technische und Polymerchemie

Tailor-made materials based on polypropylene, 15.05.08

AG Prof. Claus (gesamt 3)

Prof. Dr. Rösch, TU München, Direktor des neugegründeten TUM-Katalyseinstituts

(CRC), Aktivierung von Wasserstoff an getragenen Metallclustern: DFT-Beiträge der Theoretischen Chemie, 04.11.08

AG Prof. Müller-Plathe (gesamt 6)

Prof. Doros Theodorou, Natl. Technical University Athen, GR

Prof. Ilja Siepmann, University of Minnesota, USA

AG Prof. Reggelin (gesamt 9)

Im Rahmen des Kick-Off Meetings der Forschergruppe 934

8. Auswärtige wissenschaftliche Vorträge der Arbeitsgruppenmitglieder

Im Jahr 2008 wurden insgesamt ca. 200 auswärtige wissenschaftliche Vorträge der Arbeitsgruppenmitglieder gehalten. Aufgeführt sind lediglich Plenarvorträge bei internationalen Konferenzen:

Prof. Dr. B. Albert

Plenarvortrag: 16th International Symposium on Boron and Borides, Japan, Matsue, Sept. 2008
Experimental charge density analyses provide a better understanding of multi-centre bonds

Prof. Dr. F. Müller-Plathe

Plenarvortrag: 17th European Conference on Computational Chemistry (EUCC7), San Servolo, Venice, September 2008
Multiscale simulation of soft materials: Developments, achievements and challenges

Prof. Dr. M. Reggelin

Plenarvortrag: ISOCS-23, Moskau Russische Akademie der Wissenschaften, 04. July 2008
Stoichiometric and Catalytic Applications of Sulfoximines

Prof. Dr. H. Vogel

Plenarvortrag: High Pressure meets Advanced Fluids, Gemeinsames ProcessNet-Jahrestreffen 2008 der Fachsektion "Advanced Fluids" und des Fachausschusses "Hochdruckverfahrenstechnik", Aachen, März 2008,
Chemie in überkritischem Wasser - Grenzen und Perspektiven

9. Veröffentlichungen nach Arbeitsgruppen

9.1. Anorganische Chemie

Prof. Dr. Barbara Albert

Begutachtete:

Georgievskaya, M., Albert, B., Bubnova, R., Cordier, G., Bächtz, C. and Filatov, S. (2008). *Thermal "order-disorder" behaviour in $(Na_{1-x}K_x)_4B_8O_{14}$ solid solutions investigated by X-ray powder diffraction.* Cryst Res Technol, **43**, 1150.

Hofmann, K., Rocquefelte, X., Halet, J. F., Bächtz, C. and Albert, B. (2008). *The $\eta(6),\eta(1)$ -coordination of beryllium atoms in the graphite analogue BeB_2C_2 .* Angew Chem Int Ed, **47**(12), 2301-2303.

Hofmann, K., Rocquefelte, X., Halet, J. F., Bächtz, C. and Albert, B. (2008). *Die $\eta(6),\eta(1)$ -Koordination von Berylliumatomen im Graphit-Analogen BeB_2C_2 .* Angew Chem, **120**(12), 2333-2336.

Sennova, N., Bubnova, R.S., Cordier, G., Albert, B., Filatov, S.K. and Isaenko, L. (2008). *Temperature-dependent Changes of the Crystal Structure of $Li_2B_4O_7$.* Z Anorg Allg Chem, **634**, 2601.

Panda, M., Hofmann, K., Prosenc, M.H. and Albert, B. (2008). *Multi-centre hydrogen and dihydrogen bonds in lithium closo-hydroborate obtained from liquid ammonia.* Dalton Trans, 3956-3958.

Laubach, S., Mishra, K.C., Hofmann, K., Albert, B., Larsoen, P., Wickleder, C., McSweeney, R. and Schmidt, P.C. (2008). *Dependence of Phase Composition and Luminescence of $Sr_6BP_5O_{20}$ on Eu Concentration.* J Electrochem Soc, **155**, J205.

Sonstige: 2

Apl. Prof. i.R. Dr. B. Eisenmann

Begutachtete:

Eisenmann, B., Rhode, M., Wendorff, M. and Rohr, C. (2008). *New Sr compounds with planar Al-Si/Ge anions and a correction of $SrSi-II$ and $SrGe_{0.76}$.* Z Anorg Allg Chem, **634**(1), 153-165.

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

Begutachtete:

Beck, R. and Klein, H.F. (2008). *The crystal structures of trimethylphosphane supported nickel- and cobalt-methyl complexes: Octahedral $mer-cis-[Co^{III}I(CH_3)_2(PMe_3)_3]$ and square planar $trans-[Ni^{II}Cl(CH_3)(PMe_3)_2]$.* Z Anorg Allg Chem, **634**(11), 1971-1974.

Beck, R., Sun, H.J., Li, X.Y., Camadanli, S. and Klein, H.F. (2008). *Cyclometalation of thiobenzophenones with mononuclear methyliron and -cobalt complexes.* Eur J Inorg Chem, **21**, 3253-3257.

Beck, R., Zheng, T.T., Sun, H.J., Li, X.Y., Florke, U. and Klein, H.F. (2008). *C-H activation of diphenylphosphinoaryl-derivatives with dimethyltetrakis (trimethylphosphine)iron(II)*. J Organomet Chem, **693**(23), 3471-3478.

Camadanli, S., Beck, R., Floerke, U., Klein, H.F. (2008). *First regioselective cyclometalation reactions of cobalt in arylketones: C-H versus C-F activation*. JCS Dalton Trans, **42**, 5701-5704.

Gaube, J. and Klein, H.F. (2008). *Studies on the reaction mechanism of the Fischer-Tropsch synthesis on iron and cobalt*. J Mol Catal A, **283**, 60-68.

Gaube, J. and Klein, H. F.: *The promoter effect of alkali in Fischer-Tropsch iron and cobalt catalysts*. Appl Catal A, **350**, 126-132.

Prof. Dr. H. Plenio

Begutachtete:

an der Heiden, M.R., Plenio, H., Immel, S., Burello, E., Rothenberg, G. and Hoefsloot, H.C.J. (2008). *Insights into Sonogashira cross-coupling by high-throughput kinetics and descriptor modeling*. Chem Eur J, **13**, 2857-2866.

Fleckenstein, C.A., Kadyrov, R. and Plenio, H. (2008). *Efficient large-scale synthesis of 9-alkylfluorenyl phosphines for Pd-catalyzed cross-coupling reactions*. Org Process Res Dev, **12**, 475.

Fleckenstein, C.A. and Plenio, H. (2008). *Efficient Suzuki-Miyaura coupling of (hetero)aryl chlorides with thiophene- and furanboronic acids in aqueous n-butanol*. J Org Chem, **73**, 3236-3244.

Fleckenstein, C.A. and Plenio, H. (2008). *Highly efficient Suzuki-Miyaura coupling of heterocyclic substrates through rational reaction design*. Chem Eur J, **13**, 4267-4279.

Fleckenstein, C.A. and Plenio, H. (2008). *Aqueous cross coupling: Sustainable and practicable protocol for Sonogashira reactions of heterocycles in Water/Isopropanol mixtures*. Green Chem, **10**, 563-570.

Fleckenstein, C.A. and Plenio, H. (2008). *Synthesis of bidentate Fluorenylphosphines and the Influence of the Bite Angle on Palladium-catalyzed Cross Coupling Reactions*. Organometallics, **27**, 3924-3932.

Leuthäuser, S., Schmidts, V., Thiele, C.M. and Plenio, H. (2008). *π -face donor properties of N-heterocyclic carbenes in Grubbs II complexes*. Chem Eur J, **13**, 5465-5481.

Plenio, H. (2008). *Catalysts for the Sonogashira coupling - The crownless again shall be king*. Angew Chem Int Ed, **47**, 6954-6956.

Weyhardt, H. and Plenio, H. (2008). *Acyclic diene metathesis polymerization of divinylarenes and divinylferrocenes with Grubbs-type olefin metathesis catalysts*. Organometallics, **27**, 1479-1485.

Prof. Dr. J.J. Schneider

Begutachtete:

Joshi, R., Engstler, J., Nair, P.K., Haridoss, P. and Schneider, J.J. (2008). *High yield formation of carbon nanotubes using a rotating cathode in open air*. *Diamond Rel Mater*, **17**, 913-919.

Joshi, R., Schierholz, R., Schneider, J.J. and Haridoss, P. (2008). *Catalytic induced thermal conversion of amorphous carbon into single walled carbon nanotubes*. *Z Anorg Allg Chem*, **634**, 911-915.

Popp, A. and Schneider, J.J. (2008). *A Chip-Sized Nanoscale Monolithic Chemical Reactor*. *Angew Chem Int Ed*, **47**(46), 8958-8960.

Popp, A. and Schneider, J.J. (2008). *Ein nanostrukturierter chemischer Reaktor in Chipgröße*. *Angew Chem*, **120**(46), 9092-9095.

Schneider, J.J., Hoffmann, R.C., Engstler, J., Soffke, O., Jaegermann, W., Issanin, A. and Klyszcz, A. (2008). *A printed and flexible field-effect transistor device with nanoscale zinc oxide as active semiconductor material*. *Adv Materials*, **20**, 3383-3387.

Schneider, J.J., Maximova, N.I., Engstler, J., Joshi, R., Schierholz, R., and Feile, R. (2008). *Catalyst free synthesis of aligned carbon nanotubes*. *Inorg Chim Acta*, **361**, 1770-1778.

Schneider, J.J. und Engstler, J. (2008). *Mesoscopic Ceramic Structures in 1D, 2D and 3D*. *Ceramic Science and Technology* (Eds. Riedel, Chen), Vol. 1, Structures, VCH Wiley.

Schneider, J.J., Popp, A. and Engstler, J. (2008). *Fundamentals and Functionality of Inorganic Wires, Rods and Tubes*. In *Nanotechnology* (Eds. Schmid, G.), Vol. 1, VCH Wiley.

Schneider, J.J. (2008). *The Potential of Aligned Carbon Nanotubes as Building Blocks in Nanotechnology*. *Micro- and Nanomaterials*, **8**, 34-35.

Sonstige:

Schneider, J.J., Riedl, R. und Rikowski, E. (2008). *Nanotechnik international*. *Universitätszeitschrift hoch³ der TUD*, **2**, 18.

Schneider, J.J. (2008). *Wunderzwerge für ein neues Prinzip*. *Darmstädter Echo*.

Schneider, J.J. (2008). *TU Darmstadt beweist Exzellenz: Nano-Drucksensoren der Zukunft*. *Universitätszeitschrift hoch³ der TU Darmstadt*, **5**, 16.

9.2. Physikalische Chemie

Prof. i.R. Dr. K.-P. Dinse

Begutachtete:

Corzilius, B., Dinse, K.P. and Hata, K. (2008). *Probing the electronic properties of single-walled carbon nanotubes with resonant and non-resonant microwave absorption*. Phys E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures, **40**, 2327-2332.

Jakes, P., Gembus, A., Dinse, K. P. and Hata, K. (2008). *Electron paramagnetic resonance investigation of metalloendofullerene derived carbon nanotube peapods*. J Chem Phys, **128**(5).

Stork, H., Dinse, K.P., Fujara, F., Hamburger, A., Jakes, P., Neumann, R., Schuster, B., Schwartz, K. and Trautmann, C. (2008). *Spatially resolved characterization of Xe ion irradiated LiF crystals using static field gradient NMR*. J Phys Condens Matter, **20**(46).

Corzilius, B., Dinse, K.P., Hata, K., Haluska, M., Skakalova, V. and Roth, S. (2008). *SWNT probed by multi-frequency EPR and nonresonant microwave absorption*. Phys Stat Sol (b), **245**(10), 2251-2254.

Dinse, A., Ozarowski, A., Hess, C., Schomäcker, R. and Dinse, K.P. (2008). *The potential of high frequency EPR for the Investigation of supported Vanadium Oxide Catalysts*. J Phys Chem, **112**, 17664-17671.

Sonstige:

Dinse, K.P. and Jeschke, G. (2008). *EPR-ESR-EMR, an ongoing success story*. Bunsenmagazin, **10**(3).

PD Dr. R.A. Eichel

Begutachtete:

Eichel, R.A., Erhart, P., Traskelin, P., Albe, K., Kungl, H. and Hoffmann, M.J. (2008). *Defect-Dipole Formation in Copper-Doped PbTiO₃ Ferroelectrics*. Phys Rev Lett, **100**(9).

Zhang, L.X., Erdem, E., Ren, X.B. and Eichel, R.A. (2008). *Reorientation of (Mn-Ti^(V)-V-O(center dot center dot))(x) defect dipoles in acceptor-modified BaTiO₃ single crystals: An electron paramagnetic resonance study*. Appl Phys Letters, **93**(20).

Erdem, E., Eichel, R.A., Kungl, H., Hoffmann, M.J., Ozarowski, A., van Tol, J. and Brunel, L.C. (2008). *Characterization of (Fe_{Zr,Ti}-V_O^{1dr1dr})^{1dr} defect dipoles in (La,Fe)-codoped PZT 52.5/47.5 piezoelectric ceramics by multifrequency electron paramagnetic resonance spectroscopy*. Transactions on Ultrasonics Ferroelectrics and Frequency Control, **55**,1061.

Erdem, E., Drahus, M., Eichel, R.A., Ozarowski, A., Van Tol, J. and Brunel, L.C. (2008). *Microstructural characterization of the manganese functional center site in PbTiO₃ ferroelectrics - Multifrequency electron paramagnetic resonance and Newman superposition model analysis*. Ferroelectrics, **363**, 39-49.

Menapace, I., Mera, G., Riedel, R., Erdem, E., Eichel, R.A., Pauletti, A. and Appleby, G.A.(2008). *Luminescence of heat-treated silicon-based polymers: promising materials for LED applications*. J Mat Sci, **43**(17), 5790-5796.

Eichel, R.A. (2008). *Characterization of defect structure in acceptor-modified piezoelectric ceramics by multifrequency and multipulse electron paramagnetic resonance spectroscopy*. J Am Cer Soc, **91**(3), 691-701.

Prof. i.R. Dr. W. Haase

Begutachtete:

Chernyaev, I., Suvorova, A., Podgornov, F. and Haase, W. (2008). *Influence of the multiple beam interference on phase retardation of liquid crystal cells*. Mol Cryst Liq Cryst, **488**, 219-230.

Goelden, F., Gaebler, A., Mueller, S., Lapanik, A., Haase, W. and Jakoby, R. (2008). *Liquid-crystal varactors with fast switching times for microwave applications*. Electronics Letters, **44**, 480-481.

Goelden, F., Lapanik, A., Gaebler, A., Mueller, S., Haase, W. and Jakoby, R. (2008). *Characterization and application of liquid crystals at microwave frequencies*. Frequenz, **62**, 57-61.

Greatti, A., Scarpellini, M., Peralta, R.A., Casellato, A., Bortoluzzi, A.J., Xavier, F.R., Jovito, R., de Brito, M.A., Szpoganicz, B., Tomkowicz, Z., Rams, M., Haase, W. and Neves, A. (2008). *Synthesis, structure, and physicochemical properties of dinuclear Ni-II complexes as highly efficient functional models of phosphohydrolases*. Inorg Chem, **47**, 1107-1119.

Haldar, S., Biswas, S., Mandal, P.K., Goubitz, K., Schenk, H. and Haase, W. (2008). *X-ray structural analysis in the crystalline phase of a nematogenic fluoro-phenyl compound*. Mol Cryst Liquid Cryst, **490**, 80-87.

Haldar, S., Mandal, P.K., Prathap, S.J., Row, T.N.G. and Haase, W. (2008). *X-ray studies of the crystalline and nematic phases of 4'-(3,4,5-trifluorophenyl)-4-propylbicyclohexyl*. Liquid Cryst, **35**, 1307-1312.

Matsuhisa, Y., Takao, Y., Haase, W., Fujii, A. and Ozaki, M. (2008). *Lasing characteristics of ferroelectric liquid crystal in dielectric mirror cavity*. Ferroelectrics, **364**, 60-65.

Tomkowicz, Z., Ostrovsky, S., Muller-Bunz, H., Eltmimi, A.J.H., Rams, M., Brown, D.A. and Haase, W. (2008). *Extended triple-bridged Ni(II)- and Co(II)-hydroxamate trinuclear complexes: Synthesis, crystal structures, and magnetic properties*. Inorg Chem, **47**, 6956-6963.

Saric, S., Kniesner, B., Mehdizadeh, A., Jakirlic, S., Hanjalic, K. and Tropea, C. (Eds. Peng, S.H. and Haase, W., 2008). *Comparative assessment of hybrid LES/RANS models in turbulent flows separating from smooth surfaces*. Advances in Hybrid RANS-LES Modelling, 142-151.

Mueller, S., Koeberle, M., Goelden, F., Penirschke, A., Gaebler, A., Lapanik, A., Haase, W. and Jakoby, R. (2008). *W-band characterization of anisotropic liquid crystals at room temperature*. European Microwave Conference Proceedings, **1-3**, 477-480.

Prof. Dr. C. Hess

Begutachtete Fritz-Haber-Institut, Berlin:

Dinse, A., Ozarowski, A., Hess, C., Schomäcker, R. and Dinse, K.P. (2008). *Potential of High-Frequency EPR for Investigation of Supported Vanadium Oxide Catalysts*. J Phys Chem C, **112**(45), 17664-17671.

Akcakayiran, D., Mauder, D., Hess, C., Sievers, T.K., Kurth, D.G., Shenderovich, I., Limbach, H.H. and Findenegg, G.H. (2008). *Carboxylic Acid-Doped SBA-15 Silica as a Host for Metallo-supramolecular Coordination Polymers*. J Phys Chem B, **112**(46), 14637-14647.

Dinse, A., Frank, B., Hess, C., Habel, D. and Schomäcker, R. (2008). *Oxidative dehydrogenation of propane over low-loaded vanadia catalysts: Impact of the support material on kinetics and selectivity*. J Mol Catal A-Chem, **289**(1-2), 28-37.

Schwarz, O., Frank, B., Hess, C. and Schomäcker, R. (2008). *Characterisation and catalytic testing of VO_x/Al₂O₃ catalysts for microstructured reactors*. Catal Commun, **9**(2), 229-233.

Schwarz, O., Habel, D., Oysitser, O., Kondratenko, E.V., Hess, C., Schomäcker, R. and Schubert, H. (2008). *Impact of preparation method on physico-chemical and catalytic properties of VO_x/γ-Al₂O₃ materials*. J Mol Catal A-Chem, **293**(1-2), 45-52.

PD Dr. S.M. Kast

Begutachtete:

Kast, S.M. and Kloss, T. (2008). *Closed-form expressions of the chemical potential for integral equation closures with certain bridge functions*. J Chem Phys, **129**(23), 236101.

Kloss, T., Heil, J. and Kast, S.M. (2008). *Quantum chemistry in solution by combining 3D integral equation theory with a cluster embedding approach*. J Phys Chem B, **112**(14), 4337-4343.

Kloss, T. and Kast, S.M. (2008). *Treatment of charged solutes in three-dimensional integral equation theory*. J Chem Phys, **128**(13), 134505.

Sonstige: 1

Prof. Dr. F. Müller-Plathe

Begutachtete:

Carbone, P., Varzaneh, H.A.K., Chen, X. and Müller-Plathe, F. (2008). *Transferability of coarse-grained force fields: the polymer case*. J Chem Phys, **128**, 064904(1-11).

dos Santos, D.J.V.A., Weiss, V.C. and Müller-Plathe, F. (2008). *Consistency of Ion Adsorption and Excess Surface Tension in Molecular Dynamics Simulations of Aqueous Salt Solutions*. J Phys Chem C, **112**, 19431-19442.

Eslami, H., Mozaffari, F., Moghadasi, J. and Müller-Plathe, F. (2008). *Molecular dynamics simulation of confined fluids in isosurface-isothermal-isobaric ensemble*. J Chem Phys, **129**, 194702.

Gaube, J., David, W., Sanchayan, R., Roy, S. and Müller-Plathe, F. (2008). *Selective hydrogenation of 1,5,9-cyclo-dodecatriene towards cyclo-dodecene*. Appl Catal A, **348**, 87-94.

Heggen, B., Roy, S. and Müller-Plathe, F. (2008). *Ab initio calculations of the condensation of phosphonic acid and methylphosphonic acid: Chemical properties of potential electrolyte materials for fuel cell applications*. J Phys Chem C, **112**, 14209-14215.

Karimi-Varzaneh, H.A., Carbone, P. and Müller-Plathe, F. (2008). *Fast dynamics in coarse-grained polymer models: The effect of the hydrogen bonds*. J Chem Phys, **129**, 154904.

Karimi-Varzaneh, H.A., Carbone, P. and Müller-Plathe, F. (2008). *Hydrogen Bonding and Dynamic Crossover in Polyamide-66: A Molecular Dynamics Simulation Study*. Macromolecules, **41**, 7211-7218.

Müller, T.J., Al-Samman, M. and Müller-Plathe, F. (2008). *The influence of thermostats and manostats on reverse nonequilibrium molecular dynamics calculations of fluid viscosities*. J Chem Phys, **129**, 014102.

Polyakov, P., Müller-Plathe, F. and Wiegand, S. (2008). *Reverse Nonequilibrium Molecular Dynamics Calculation of the Soret Coefficient in Liquid Heptane/Benzene Mixtures*. J Phys Chem B, **112**, 14999-15004.

Qian, H.J., Carbone, P., Chen, X.Y., Karimi-Varzaneh, H.A., Liew, C.C. and Müller-Plathe, F. (2008). *Temperature-Transferable Coarse-Grained Potentials for Ethylbenzene, Polystyrene, and Their Mixtures*. Macromolecules, **41**, 9919-9929.

Roy, S., Ataol, T.M. and Müller-Plathe, F. (2008). *Molecular dynamics simulations of heptyl phosphonic acid: A potential polymer component for fuel cell polymer membrane*. J Phys Chem B, **112**, 7403-7409.

Tarmyshov, K.B. and Müller-Plathe, F. (2008). *Treatment of electrostatic interactions in simulations of the interface between transition metal surfaces and organic matter: the discrete classical model and the reaction-field dielectric method*. Phys Chem Chem Phys, **10**, 442-448.

Wei, Z., Leroy, F., Balasubramanian, S. and Müller-Plathe, F. (2008). *Shear viscosity of the ionic liquid 1-n-butyl 3-methylimidazolium hexafluorophosphate [bmim][PF₆] computed by reverse nonequilibrium molecular dynamics*. J Phys Chem B, **112**, 8129-8133.

Weiss, V.C. and Schröer, W. (2008). *Liquid-vapor asymmetry in mean-field theories of simple, polar and ionic fluids*. J Stat Mech – Theor & Exper, P04020.

Butka, A., Vale, V.R., Saracsan, D., Rybarsch, C., Weiss, V.C. and Schröer, W. (2008). *Liquid-liquid phase transition in solutions of ionic liquids with halide anions: Criticality and corresponding states*. Pure Appl Chem, **80**, 1613-1630.

Müller, T.J., Roy, S. Zhao, W. Maaß, A. and Reith, D. (2008). *Economic simplex optimization for broad range property prediction: Strengths and weakness of an automated approach for tailoring of parameters*. Fluid Phase Equil, **274**, 27-35.

Zhao, W., Rog, T., Gurtovenko, A.A., Vattulainen, I. and Karttunen, M. (2008). *Role of phosphatidylglycerols in the stability of bacterial membranes*. Biochimie, **90**, 930-938.

Illya, G. and Deserno, M. (2008). *Coarse-Grained Simulation Studies of Peptide-Induced Pore Formation*. Biophys J, **95**, 4163-4173.

Sonstige:

Eslami, H. and Müller-Plathe, F. (2008). *Solvation in Polymers*. In S. Canuto (Ed.) Solvation Effects. Methods and Applications, Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics, Springer Heidelberg, 279-320.

Müller-Plathe, F. (2008). *Schlecht, gut, exzellent: Rating und Ranking der deutschen Chemie*. Nachr Chemie, **56**, 182.

Müller-Plathe, F. (2008). *An der Universität stimmt die Chemie*. Hoch³, TU Darmstadt, Februar, 9.

Tarmyshov, K.B. and Müller-Plathe, F. (2008). *Molecular Dynamics Simulations of PVA/Pt(111) interfaces*. In NIC Symposium 2008, Proceedings (Eds. Münster, G., Wolf, D. and Kremer, M.), NIC Series, **39**, 263-270.

Prof. Dr. R. Schäfer

Begutachtete:

Schäfer, S., Assadollahzadeh, B., Mehring, M., Schwerdtfeger, P. and Schäfer, R. (2008). *Structure and Electric Properties of SnN Clusters (N=6-20) from Combined Electric Deflection Experiments and Quantum Theoretical Studies*. J Phys Chem A, **112**, 12312.

Schäfer, S., Heiles, S., Becker, J.A. and Schäfer, R. (2008). *Electric deflection studies on lead clusters*. J Chem Phys, **129**(4).

Schäfer, S. and Schäfer, R. (2008). *Dielectric response of germanium clusters*. Phys Rev B, **77**, 20521.

Schäfer, S. and Schäfer, R. (2008). *New stable molecular cage clusters of Pb by encapsulation of Mg*. Chem Phys Chem, **9**, 1925.

Thierfelder, C., Assadollahzadeh, B., Schwerdtfeger, P., Schäfer, S. and Schäfer, R. (2008). *Relativistic and electron correlation effects in static dipole polarizabilities for the group-14 elements from carbon to element Z=114: Theory and experiment*. Phys Rev A, **78**, 052506.

Turra, M., Waldschmidt, B., Kaiser, B. and Schäfer, R. (2008). *An improved time-of-flight method for cluster deposition and ion-scattering experiments*. Rev Sci Instrum, **79**, 013905.

Prof. i.R. Dr. P.C. Schmidt

Begutachtete:

Laubach, S., Mishra, K.C., Hofmann, K., Albert, B., Larsen, P., Wickleder, C., McSweeney, R. and Schmidt, P.C. (2008). *Dependence of phase composition and luminescence of Sr₆BP₅O₂₀ on eu concentration*. J Electrochem Soc, **155**(7), J205-211.

Nagarajan, L., De Souza, R.A., Samuelis, D., Valov, I., Borger, A., Janek, J., Becker, K.D., Schmidt, P.C. and Martin, M. (2008). *A chemically driven insulator-metal transition in non-stoichiometric and amorphous gallium oxide*. Nature Materials, **7**(5), 391-398.

9.3. Technische Chemie

Prof. Dr. P. Claus

Begutachtete:

Arras, J., Steffan, M., Shayeghi, Y. and Claus, P. (2008). *The promoting effect of a dicyanamide based ionic liquid in the selective hydrogenation of citral*. Chem Commun, **34**, 4058-4060.

Bron, M., Teschner, D., Wild, U., Steinhauer, B., Knop-Gericke, A., Volckmar, C., Wootsch, A., Schlögl, R. and Claus, P. (2008). *Oxygen-induced activation of silica supported silver in acrolein hydrogenation*. Appl Catal A: General, **341**, 127-132.

Claus, P. and Vogel, H. (2008). *The roll of chemocatalysis in the establishment of the technology platform. Renewable resources*. Chem Eng Technol, **31**, 678-699.

Hlukhyy, V., Raif, F., Claus, P. and Fässler, T.F. (2008). *Polar intermetallic compounds as catalysts for hydrogenation reactions: Synthesis, structures, bonding, and catalytic properties of $Ca_{1-x}Sr_xNi_4Sn_2$ ($x=0.0, 0.5, 1.0$) and catalytic properties of Ni_3Sn and Ni_3Sn_2* . Chem Eur J, **14**, 3737-3744.

Klasovsky, F., Hohmeyer, J., Brückner, A., Bonifer, M., Arras, J., Steffan, M., Lucas, M., Radnik, J., Roth, C. and Claus, P. (2008). *Catalytic and Mechanistic Investigation of Polyaniline Supported PtO_2 Nanoparticles: A Combined in situ/operando EPR, DRIFTS, and EXAFS Study*. J Phys Chem C, **112**, 19555-19559.

Steffan, M., Klasovsky, F., Arras, J., Roth, C., Radnik, J., Hofmeister, H. and Claus, P. (2008). *Carbon-carbon double bond versus carbonyl group hydrogenation: Controlling the intramolecular selectivity with polyaniline-supported platinum catalysts*. Adv Synth Catal, **350**, 1337-1348.

Lehnert, K. and Claus, P. (2008). *Influence of Pt particle size and support type on the aqueous-phase reforming of glycerol*. Catal Commun, **9**, 2543-2546.

Önal, Y. and Claus, P. (2008). *Engineering Aspects of Aqueous Biphasic Catalysis*. In Topics Organom Chem, Regulated System for Multiphase Catalysis (Eds. Leitner, W. and Hölscher, M.), **23**, 163-191.

Arras, J., Steffan, M. and Claus, P. (2008). *Hydrogenation of Citral using Ionic Liquids as Bulk Solvents or as Supported Ionic Liquid Layers. SynTop Conference, Smart Synthesis and Technologies for Organic Processes*. In VDI-Berichte (Hrsg. VDI Wissensforum GmbH), VDI-Verlag, Düsseldorf, **2039**, 109-114.

Sonstige: 19

Prof. em. Dr. J. Gaube

Begutachtete:

Gaube, J. and Klein, H.F. (2008). *Studies on reaction mechanism of the Fischer-Tropsch synthesis on iron and cobalt*. J Mol Catal A-Chem, **283**, 60-68.

Gaube, J. and Klein, H.F. (2008). *The promoter effect of alkali in Fischer-Tropsch iron and cobalt catalysis*. Appl Catal A, **350**, 126-132.

Gaube, J., David, W., Sanchayan, R., Roy, S. and Müller-Plathe, F. (2008). *Selective hydrogenation of 1,5,9-cyclo-dodecatriene towards cyclo-dodecene*. Appl Catal A, **343**, 87-94.

Sonstige:

Arnold, H., Döbert, F. and Gaube, J. (2008). *Selective Hydrogenation of Hydrocarbons*. In Handbook of Heterogenous Catalysis (Eds. Ertl, G. et al.) Wiley-VCH, 8 Vol., Section 14.10.1, 3266-3284.

Prof. Dr. H. Vogel

Begutachtete:

Kruse, A. and Vogel, H. (2008). *Heterogene Katalyse in überkritischen Medien: 2. Nah- und überkritisches Wasser*. Chem Ing Technol, **80**, 567-572.

Kruse, A. and Vogel, H.: *Heterogene Katalyse in überkritischen Medien-Teil 3: Sonstige*. Chem Ing Technol, **31**.

Kruse, A. and Vogel, H. (2008). *Heterogeneous Catalysis in Supercritical Media-Part 3: Other Media*. Chem Eng Technol, **31**, 1391-1395.

Kruse, A. and Vogel, H. (2008). *Heterogeneous catalysis in Supercritical Media: 2. Near-critical and Supercritical Water*. Chem Eng Technol, **31**, 1241-1245.

Kruse, A. and Vogel, H. (2008). *Heterogeneous Catalysis in Supercritical Media: 1. Carbon Dioxide*. Chem Eng Technol, **31**, 23-32.

Vogel, H. (2008). *Change in raw material base in the chemical industry*. Chem Eng Technol, **31**, 730-735.

Claus, P. and Vogel, H. (2008). *The roll of chemocatalysis in the establishment of the technology platform "Renewable resources"*. Chem Eng Technol, **31**, 678-699.

Schuler, A., Votsmeier, M., Kiwic, P., Malmberg, J., Gieshoff, J., Drochner, H. and Vogel, H. (2008). *Dynamic Model for the Selective Catalytic Reduction of NO with NH₃ on Fe-Zeolite Catalysts*. SAE World Congress & Exhibition Control, Session: Diesel Exhaust Emission Control, SAE International, 1323.

Sonstige:

Vogel, H. (2008). *Technologie zur Herstellung von Designerkraftstoffen*. Thema Forschung, TU Darmstadt, **3**, 32-36.

Drochner, A., Symalla, M. und Vogel, H. (2008). *Diffuse-Reflexions-Infrarot-Fourier-Transformations-Spektroskopie (DRIFTS)*. Bunsenmagazin, **1**, 10-23.

Jekewitz, T., Endres, S., Drochner, A., Blickhan, N. and Vogel, H. (2008). *Der Einfluss von Wasser auf die Mischoxid-katalysierte Selektivoxidation von Acrolein zu Acrylsäure*. Chem. Ing. Techn., **80**, 1271.

Sarlea, M. Kohl, S. and Vogel, H. (2008). *Hydrolyse von Nitrilen in überkritischem Wasser am Beispiel von Valeronitril*. Chem. Ing. Techn., **80**, 1400.

Berg, J., Contiu, C., Drochner, A. and Vogel, H. (2008). *Partialoxidationen an Cu/Cu_xO-Katalysatoren*. Chem. Ing. Techn., **80**, 1272.

Vogel, H. (2008). *Biosprit vom Acker und aus dem Meer. Von Brennstoffzellen bis Leuchtdioden*. Broschüre Energie und Chemie – Ein Bündnis für die Zukunft. Hrsg. Deutsche Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie.

Vogel, H. (2008). *Keine Konkurrenz zu Nahrungsmitteln*. Bayer Research, **20**, 19.

9.4. Makromolekulare Chemie

Prof. Dr. M. Biesalski

Begutachtete Universität Freiburg:

Loschonsky, S., Couet, J. and Biesalski, M. (2008): *Synthesis of peptide/polymer conjugates by solution ATRP of butylacrylate using an initiator-modified cyclic D-alt-L-peptide*. *Macromol Rapid Comm*, **29**, 309-315.

Couet, J. and Biesalski, M. (2008). *Polymer-wrapped peptide nanotubes: Peptide-grafted polymer mass impacts length and diameter*. *Small*, **4**, 1008-1016.

Loschonsky, S., Shroff, K., Wörz, A., Rühle, J. and Biesalski, M. (2008). *Surface-attached PDMAA-GRGDSP hybrid monolayers that promote the adhesion of living cells*. *Biomacromolecules*, **9**, 534-542.

Sonstige:

Rühle, J. and Biesalski, M. (2008). *Biocompatibility of Microsystems*. In *Comprehensive Microsystems*, (Eds. H. Zappe et al.), Vol. I, 107-130, Elsevier NL.

PD Dr. G.P. Hellmann

Begutachtete DKI:

Still, T., Sainidou, R., Retsch, M., Spahn, P., Hellmann, G.P. and Fytas, G. (2008). *The “music” of core-shell spheres and hollow capsules: Influence of the architecture on the mechanical properties at the nanoscale*. *Nanoletters*, **8**, 3194.

PD Dr. H. Pasch

Begutachtete TUD:

Mass, V., Bellas, V. and Pasch, H. (2008). *Two-Dimensional Chromatography of Complex Polymers, 7-Detailed Study of Polystyrene-block-Polyisoprene Diblock Copolymers Prepared by Sequential Anionic Polymerization and Coupling Chemistry*. *Macromol Chem Phys*, **209**(19), 2026-2039.

Begutachtete DKI:

Oo, C.W., Pizzi, A., Pasch, H. and Kassim, M.J. (2008). *Study on the structure of mangrove polyflavonoid tannins with MALDI-TOF mass spectrometry*. *J Appl Polym Sci*, **109**(2), 963-967.

Raust, J.A., Brüll, A., Moire, C., Farcet, C. and Pasch, H. (2008). *Two-dimensional chromatography of complex polymers - 6. Method development for (meth)acrylate-based copolymers*. *J Chromatogr A*, **1203**(2), 207-216.

Spriestersbach, K.H., Rittig, F. and Pasch, H. (2008). *Separation of non-UV-absorbing synthetic polyelectrolytes by CE with contactless conductivity detection*. *Electrophoresis*, **29**(21), 4407-4411.

Albrecht, A., Brüll, R., Macko, T., Sinha, P. and Pasch, H. (2008). *Analysing the Chemical Composition Distribution of Ethylene-Acrylate Copolymers: Comparison of HT-HPLC, CRYSTAF and TREF*. *Macromol Chem Phys*, **209**(18), 1909-1919.

Laun, S., Pasch, H., Longiéras, N. and Degoulet, C. (2008). *Molar mass analysis of polyamides-11 and -12 by size exclusion chromatography in HfIP*. *Polymer*, **49**(21), 4502-4509.

Despres, A., Pizzi, A., Vu, C. and Pasch, H. (2008). *Formaldehyde-Free Aminoresin Wood Adhesives Based on Dimethoxyethanal*. *J Appl Polym Sci*, **110**(6), 3908-3916.

Tondi, G., Pizzi, A., Pasch, H. and Celzard, A. (2008). *Structure degradation, conservation and rearrangement in the carbonisation of polyflavonoid tannin/furanic rigid foams – A MALDI-TOF investigation*. *Polym Degrad Stab*, **93**(5), 968-975.

Macko, T., Schulze, U., Brüll, R., Albrecht, A., Pasch, H., Fónagy, T., Häussler, L. and Iván, B. (2008). *Monitoring the Chemical Heterogeneity and the Crystallization Behavior of PP-g-PS Graft Copolymers Using SEC-FTIR and CRYSTAF*. *Macromol Chem Phys*, **209**(4), 404-409.

Sonstige:

Pasch, H., Albrecht, A., Macko, T. and Brüll, R. (2008). *Möglichkeiten der Hochtemperatur-HPLC*. *GIT Labor-Fachzeitschrift*, **3**, 208.

Prof. Dr. M. Rehahn

Begutachtete:

Langecker, J. and Rehahn, M. (2008). *Iridium-functionalized polyfluorenes: Advantages and limitations of the Suzuki and Yamamoto approaches*; *Macromol Chem Phys*, **209**.

Schwalm, T. and Rehahn, M. (2008). *Gel formation during the Gilch synthesis of poly(p-phenylene vinylenes): Evidence of an unexpected explanation*. *Macromol Rapid Comm*, **29**.

Schwalm, T. and Rehahn, M. (2008). *Efficient Oxygen-Induced Molar-Mass Control of Poly(p-phenylene vinylenes) Synthesized via the Gilch Route*. *Macromol Rapid Comm*, **29**, 207.

Klein, R. (2008). *Polymilchsäure auf dem Vormarsch – Kunststoffe aus nachwachsenden Rohstoffen*. *KunststoffTrends*, **5**, 44.

9.5. Organische Chemie

Prof. Dr. W.-D. Fessner

Begutachtete:

Grundmann, P. and Fessner, W.D. (2008). *One-pot, regioselective synthesis of substituted arylglycines for kinetic resolution by penicillin G acylase*. *Adv Syn Catal*, **350**(11-12), 1729-1735.

Sonstige: 2

Prof. em. Dr. F.W. Lichtenthaler

Begutachtete:

Brehm, M., Gockel, V.H., Jarglis, P. and Lichtenthaler, F.W. (2008). *Expedient conversion of D-glucose into 1,5-anhydro-D-fructose and into single stereogenic-center dihydropyranones, suitable six-carbon scaffolds for concise syntheses of the soft-coral constituents (-)-bisetone and (-)-palythazine*. *Tetrahedron-Asymmetr*, **19**.

PD Dr. R. Meusinger

Begutachtete:

Meusinger, R. (2008). *Solution to spectroscopy challenge 12*. *Anal Bioanal Chem*, **390** (5), 1219-1220.

Meusinger, R. (2008). *Spectroscopy challenge 13*. *Anal Bioanal Chem*, **392** (5), 767-770.

Prof. Dr. M. Reggelin

Begutachtete:

Reggelin, M., Slavik, S. and Bühle, P. (2008). *C-C bond-forming desulfurizations of sulfoximines*. *Org Lett*, **10**, 4081-4084.

Prof. Dr. B. Schmidt

Begutachtete:

Kukar, T.L., Ladd, T.B., Bann, M.A., Fraering, P.C., Narlawar, R., Maharvi, G.M., Healy, B., Chapman, R., Welzel, A.T., Price, R.W., Moore, B., Rangachar, V., Cusack, B., Eriksen, J., Jansen-West, K., Verbeeck, C., Yager, D., Eckman, C., Ye, W. J., Sagi, S., Cottrell, B. A., Torpey, J., Rosenberry, T.L., Fauq, A., Wolfe, M.S., Schmidt, B., Walsh, D.M., Koo, E.H. and Golde, T.E. (2008). *Substrate-targeting gamma-secretase modulators*. Nature, **453**(7197), 925-962.

Narlawar, R., Pickhardt, M., Leuchtenberger, S., Baumann, K., Krause, S., Dyrks, T., Weggen, S., Mandelkow, E. and Schmidt, B. (2008). *Curcumin-derived pyrazoles and isoxazoles: Swiss army knives or blunt tools for Alzheimer's disease?*. ChemMedChem, **3**, 165-172.

Werner, D., Werner, U., Meybaum, A., Schmidt, B., Umbreen, S., Grosch, A., Lestin, H.G., Graf, B., Zolk, O. and Fromm, M.F. (2008). *Determinants of steady-state torasemide pharmacokinetics - Impact of pharmacogenetic factors, gender and angiotensin II receptor blockers*. Clin Pharmacokinet, **47**(5), 323-332.

Baumann, S., Höttecke, N. and Schmidt, B. (2008). *Gamma-Secretase as a target for Alzheimer Disease*. In Medicinal Chemistry of Alzheimer`s Disease (Eds. Martinez, A.), Research Signpost.

Dr. C.M. Thiele

Begutachtete:

Thiele, C.M. (2008). *Residual Dipolar Couplings (RDCs) in Organic Structure Determination*. Eur J Org Chem, **34**, 5673-5685.

Leuthäuser, S., Schmidts, V., Thiele, C.M. and Plenio, H. (2008). *π -face donor properties of N-heterocyclic carbenes in Grubbs II complexes*. Chem-A Eur J, **14**, 5465-5481.

9.6. Biochemie

Prof. Dr. N.A. Dencher

Begutachtete:

Dani, D. and Dencher, N.A. (2008). *Native-DIGE: A new look at the mitochondrial membrane proteome*. *Biotechnology J*, **3**, 817-822.

Pieper, J., Buchsteiner, A., Dencher, N.A., Lechner, R. E. and Hauss, T. (2008). *Transient protein softening during the working cycle of a molecular machine*. *Phys Rev Letters*, **100**, 228103-1-228103-4.

Suhai, T., Dencher, N.A., Poetsch, A. and Seelert, H. (2008). *Remarkable stability of the proton translocating F_1F_0 -ATP synthase from the thermophilic cyanobacterium *Thermosynechococcus elongatus* BP-1*. *Biochim Biophys Acta-Biomembranes*, **1778**, 1131-1140.

Teixeira, S.C.M., Zaccai, G., Ankner, J., Bellissent-Funel, M.C., Bewley, R., Blakeley, M.P., Callow, P., Coates, L., Dahint, R., Dalgliesh, R., Dencher, N.A., Forsyth, V.T., Fragneto, G., Frick, B., Gilles, R., Gutberlet, T., Haertlein, M., Hauss, T., Haussler, W., Heller, W.T., Herwig, K., Holderer, O., Juranyi, F., Kampmann, R., Knott, R., Krueger, S., Langan, P., Lechner, R.E., Lynn, G., Majkrzak, C., May, R.P., Meilleur, F., Mo, Y., Mortensen, K., Myles, D.A.A., Natali, F., Neylon, C., Niimura, N., Ollivier, J., Ostermann, A., Peters, J., Pieper, J., Ruhm, A., Schwahn, D., Shibata, K., Soper, A. K., Strassle, T., Suzuki, J., Tanaka, I., Tehei, M., Timmins, P., Torikai, N., Unruh, T., Urban, V., Vavrin, R. and Weiss, K. (2008). *New sources and instrumentation for neutrons in biology*. *Chem Phys*, **345**, 133-151.

Maas, M.F.P.M., Krause, F., Dencher, N.A. and Sainsar-Chanet, A. (2008). *Respiratory complexes III and IV are not essential for the assembly/stability of Complex I in fungi*. *J Mol Biol*, **387**(3), 259-269.

Dante, S., Hauß, T., Brandt, A. and Dencher, N.A. (2008). *Membrane fusogenic activity of the Alzheimer's peptide A β (1-42) demonstrated by small-angle neutron scattering*. *J Mol Biol*, **376**, 393-404.

Krause, F. and Seelert, H. (2008). *Detection and Analysis of Protein-Protein Interactions of Organellar and Prokaryotic Proteomes by Blue Native and Colorless Native Gel Electrophoresis*. In *Current Protocols in Protein Science* (Eds. Coligan, J.E. et al.), John Wiley and Sons, Inc. S. UNIT 14.11: 11-36; republished as UNIT 19.18.

Seelert, H. and Krause, F. (2008). *Preparative isolation of protein complexes and other bioparticles by elution from polyacrylamide gels*. *Electrophoresis*, **29**, 2617-2636.

Ruettinger, A., Kiselev, M.A., Hauß, T., Dante, S., Balagurov, A.M. and Neubert, R.H. (2008). *Fatty acid interdigitation in stratum corneum model membranes: a neutron diffraction study*. Eur Biophys J, **37**(6), 759-771.

Pieper, J., Hauß, T., Buchsteiner, A. and Renger, G. (2008). *The effect of hydration on protein flexibility in photosystem II of green plants studied by quasielastic neutron scattering*. Eur Biophys J, **37**(5), 657-663.

Milani, S., Bombelli, F.B., Berti, D., Hauß, T. and Baglioni, P. (2008). *Nucleolipid membranes: structure and molecular recognition*. J Phys-Condens Mat, **20**(10), 104212.

Milani, S., Berti, D., Dante, S., Hauss, T. and Baglioni, P. (2008). *Intercalation of Single-Strand Oligonucleotides between Nucleolipid Anionic Membranes: A Neutron Diffraction Study*. Langmuir.

Kiselev, M.A., Zemlyanaya, E.V., Ryabova, N.Y., Hauss, T., Dante, S. and Lombardo, D. (2008). *Water distribution function across the curved lipid bilayer: SANS study*. Chem Phys, **345**(2-3), 185-190.

Kessner, D., Kiselev, M.A., Hauß, T., Dante, S., Wartewig, S. and Neubert, R.H. (2008). *Localisation of partially deuterated cholesterol in quaternary SC lipid model membranes: a neutron diffraction study*. Eur Biophys J, **37**(6), 1051-1057.

Kessner, D., Kiselev, M., Dante, S., Hauß, T., Lersch, P., Wartewig, S. and Neubert, R.H.H. (2008). *Arrangement of ceramide [EOS] in a stratum corneum lipid model matrix: new aspects revealed by neutron diffraction studies*. Eur Biophys J, **37**(6), 989-999.

Prof. em. Dr. H.G. Gassen

Begutachtete:

Gassen, H.G. (2008). *Why Neuroethics?* Biotechnol J, **3**(12), 1463-1465.

Janssens, B. and Gassen, H.G. (2008). *No advances without methods in biotech*; Biotechnol J, **3**(3), 283.

Gassen, H.G. (2008). *Das Gehirn*. Wissenschaftliche Buchgesellschaft Darmstadt.

Prof. Dr. H. Kolmar

Begutachtete:

Avrutina, O., Schmoldt, H.U., Gabrijelcic-Geiger, D., Wentzel, A., Frauendorf, H., Sommerhoff, C.P., Diederichsen, U. and Kolmar, H. (2008). *Head-to-tail cyclized cystine-knot peptides by a combined recombinant and chemical route of synthesis*. Chem Biochem, **9**, 33.

Becker, S., Höbenreich, H., Vogel, A., Knorr, J., Wilhelm, S., Rosenau, F., Jaeger, K.E., Reetz, M.T. and Kolmar, H. (2008). *Einzelzellbasierte Hochdurchsatz-Durchmusterung zur Identifizierung enantioselektiver hydrolytischer Enzyme*. Angew Chem, **120**, 5163.

Becker, S., Höbenreich, H., Vogel, A., Knorr, J., Wilhelm, S., Rosenau, F., Jaeger, K.E., Reetz, M.T. and Kolmar, H. (2008). *Single-Cell High Throughput Screening to Identify Enantioselective Hydrolytic Enzymes*. Angew Chem Int Ed, **47**(27), 5085-5088.

Kolmar, H. (2008). *Biological activity and therapeutic potential of cystine-knot miniproteins*. FEBS J, **275**, 2684.

Kolmar, H. and Skerra, A. (2008). *Alternative binding proteins get mature: Rivalling antibodies*. FEBS J, **275**, 2667.

Avrutina, O., Nguyen, D.L., Diederichsen, U. Hernandez, J.F., Gracy, J. Kolmar, H. and Chiche, L. (2008). *Knottin Cyclization: Impact on Structure and Dynamics*. BMC Struct Biol, **8**, 54.

Werle, M., Kolmar, H., Albrecht, R., et al. (2008). *Characterisation of the barrier caused by lumenally secreted gastro-intestinal proteolytic enzymes for two novel cystine-knot microproteins*. Amino Acids, **35**, 195.

10. Patente

10.1. Neuanmeldungen 2008

Prof. Dr. P. Claus

Verfahren zur Herstellung eines geträgerten Katalysators für die Oxidation von Kohlenmonoxid, dieser geträgerte Katalysator sowie ein Verfahren zur Oxidation von Kohlenmonoxid, P. Claus, M. Steffan, J. Arras, M. Lucas, M. Bonifer, Anmeldung am 21.05.2008, PCT/DE 2008/00855

Prof. Dr. W. Haase

Chiral Compounds, Cholesteric and Ferroelectric Liquid Crystal Compositions comprising these chiral Compounds, and Liquid Crystal Displays comprising these Liquid Crystal Compositions, W. Haase, 208091 BLH PCT

Prof. Dr. C. Hess

Langmuir-Blodgett Nanostructure Monolayer, P. Yang, F. Kim, A. Tao, C. Hess (Anmelder: P. Yang, Lawrence Berkeley National Lab), B03-095-3US, US Divisional Patent Application

Prof. Dr. H. Kolmar

Microproteins with PTH-like activity. K. Kolmar, E. Boehnlein, U. Junker. Europäische Patentanmeldung 2008.

Prof. Dr. M. Rehahn

Gilch-Photopolymerisation

Prof. Dr. H. Vogel

Verwendung eines pulverförmigen Übergangsmetalloxids als Katalysator, S. Herrmann, H. Vogel, Hornung, (Anmelder: Forschungszentrum Karlsruhe)

Arbeitsmedium zur Abwärmerekuperation, H. Vogel und M. Seifert (Anmelder: BMW)

Verfahren zur selektiven Herstellung von 3-Methylpyridin (3-Picolin) aus Acrolein und einem in Wasser gelöstem Ammoniumsalz, H. Vogel (Anmelder: Lonza AG)

Verfahren zur selektiven Herstellung von Acetaldehyd aus Acrolein und einem in Wasser gelöstem Ammoniumsalz, H. Vogel, G. Aras (Anmelder: Lonza AG)

Verfahren zur Herstellung von 2-Butanon in heißem Hochdruckwasser mit Elektrolytzusatz, H. Vogel, A. Baumgartl, S. Lehr (Anmelder: Wacker AG)

10.2. Bestand an erteilten Patenten und Ersterteilungen 2008

	Bestand	Ersterteilungen		Bestand	Ersterteilungen
B. Albert	1		H. Plenio	3	
P. Claus	3	1	B. Schmidt	11	
K.-P. Dinse	2		J.J. Schneider	3	
W. Haase	16		M. Rehahn	1	1
C. Hess	1		H. Vogel	24	
H. Kolmar	3				

11. Herausgebertätigkeiten

Prof. Dr. B. Albert

Associate Editor: *Solid State Sciences*

Prof. Dr. M. Biesalski

Editorial Board Member: *The Open Journal of Macromolecules*, Bentham Sci Publ

Prof. Dr. P. Claus

Editorial Board Member: *Applied Catalysis B: Environmental*

Editorial Board Member: *The Open Physical Chemistry Journal*

Prof. Dr. K.-P. Dinse

Editorial Board Member: *Journal of Magnetic Resonance*

Associate Editor: *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*

Prof. W.-D. Fessner

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

Academic Advisory Board Member: *Advanced Synthesis and Catalysis*

Prof. Dr. H.G. Gassen

Editor in Chief: *Biotechnology Journal*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.

Prof. Dr. W. Haase

Editorial Board Member: *Ferroelectrics*

Editorial Board Member: *Molecular Materials*

Prof. Dr. F. Müller-Plathe

Editor in Chief: *Soft Materials*

Prof. Dr. B. Schmidt

Editorial Board Member: *Journal of Neurodegenerative Disease*

Editorial Advisory Board: *Recent Patents on CNS Drug Discovery*

Editorial Advisory Board: *Recent Patents on Cardiovascular Drug Discovery*

Prof. Dr. P.C. Schmidt:

Editor: *Bunsenmagazin*

12. Drittmittel

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

Nach Geldgebergrp.	Einnahmen in €	Ausgaben in €	Einnahmen in %	Ausgaben in %
Bund Summe	565.001,37	488.784,10	10,9	11,4
DFG Summe	2.145.346,19	2.251.014,63	41,3	52,6
EU Summe	438.157,98	142.854,51	8,5	3,3
Industrie Summe	1.818.180,16	1.178.939,08	35,0	27,6
Sonstige Summe	223.086,97	216.437,84	4,3	5,1
Gesamtergebnis	5.189.772,67	4.278.030,16	100,0	100,0

Das Aufkommen ist gegenüber 2007 **um 31 % gestiegen**.

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. **786.000 €**

Zu diesen versteckten Personalmitteln kommen diverse Zuwendungen, Geldspenden, Sachspenden, Schenkungen usw., die direkt an Arbeitsgruppen geleistet wurden. Diese beliefen sich auf ca. **34.000 €**

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 **360.800 €** geschätzt. Der Hauptanteil (334.800 €) entfällt auf Messzeit am Neutronendiffraktometer des Helmholtz-Zentrum in Berlin (Prof. Dencher).

12.3. Gesamte Drittmittel 2008

Zusammengerechnet belaufen sich die 2008 umgesetzten Drittmittel des Fachbereichs Chemie auf ca. **6.300.000 €**. Darin sind die Drittmittel des Deutschen Kunststoffinstituts nicht enthalten.

12.4. Neu angeworbene Drittmittel

Die am Fachbereich Chemie tätigen Professoren und leitenden Wissenschaftler haben im Jahr 2008 neue Forschungsanträge gestellt, bzw. sind Kooperationsverträge eingegangen. Die 2008 neu zugesagten (Datum Bewilligungsbescheid, Kooperationsvertrag bzw. Forschungsauftrag) Drittmittel belaufen sich auf ca. **5.200.000 €**. In diesem Betrag sind weder versteckte Drittmittel, noch neu akquirierte Projekte des Deutschen Kunststoffinstituts enthalten. Die Projektlaufzeiten liegen überwiegend zwischen 2 und 3 Jahren.

13. GastwissenschaftlerInnen am Fachbereich Chemie

Dr. Paola Carbone

Universität Bologna, Humboldt-Stipendiatin (Prof. Müller-Plathe)

Prof. Hossein Eslami

Persian Gulf University Boushehr, Iran, Gastprofessor, Stipendium des Center of Smart Interfaces (Prof. Müller-Plathe)

Dr. Peter Kraikivskii

DAAD-Programm (Prof. Schneider)

Prof. Dr. Moritake

Japan, Humboldt-Forschungspreisträger (Prof. Haase)

Olavinka Olatunji-Ojo

Texas Southern University, Gastwissenschaftlerin, DAAD RISE-Programm (Prof. Müller-Plathe)

Soumya Saswati Sarangi

Jawaharlal Nehru Center for Advanced Scientific Research Bangalore Indien, Gastwissenschaftlerin, DAAD-Programm (Prof. Müller-Plathe)

Fatemeh Sabzi Sarvestani

Shiraz University, Iran, Stipendium Iranian Ministry of Science and TU Darmstadt Promotionsstipendium (Prof. Müller-Plathe)

Prof. Dr. Kadir Yurdakoc

Universität Iszmir (Prof. Claus)

14. Extern beschäftigte MitarbeiterInnen des Fachbereichs Chemie

Dipl.-Ing. Axel Pachulski

Doktorarbeit Shell (Prof. Claus)

Dipl.-Ing. Alikri Kriyopolus

Doktorarbeit SC (Prof. Claus)

Dipl.-Ing. Elham Schokraie

Doktorarbeit am DKFZ Heidelberg (Prof. Dencher)

Dipl.-Ing. Lyudmila Nilsen

Doktorarbeit Universität Stavanger (Prof. Fessner)

Dr. Stefan Becker

Kooperationsprojekt Firma Merck KGaA (Prof. Kolmar)

M.Sc. Achim Boltz

Doktorarbeit Firma Merck KGaA (Prof. Kolmar)

Dipl.-Ing. Natalya Karpenko

Doktorarbeit Georg-Speyer-Haus Frankfurt (Prof. Kolmar)

M.Sc. Birgit Piater

Doktorarbeit Firma Merck KGaA (Prof. Kolmar)

M.Sc. Alice Julliart

Doktorarbeit Firma Merck KGaA (Prof. Rehahn)

Dipl.-Ing. Angela Lennert

Doktorarbeit Firma Merck KGaA (Prof. Rehahn)

Dipl.-Ing. Anke Schuler

Doktorarbeit Umicore Ag & Co. KG (Prof. Vogel)

Dipl.-Ing. Susanne Ungermann

Doktorarbeit Umicore Ag & Co. KG (Prof. Vogel)

Dipl.-Ing. Alexander Scheuer

Doktorarbeit Umicore Ag & Co. KG (Prof. Vogel)

15. Preise an Mitglieder des Fachbereichs 2008

Dipl.-Ing. Armin Brandner (Prof. Claus)

Young Scientist Award (International Congress on Catalysis, Korea, Juli 2008) für seine seitens der Industrie geförderten Arbeiten zur Umwandlung von Glycerin mit Luftsauerstoff zu wertvollen Oxidationsprodukten (z.B. zu Dihydroxyaceton) unter Mitwirkung von Gold- und Platin-Katalysatoren

Vortrags-Preis der Deutschen Katalytikertagung 2008

Dipl.-Ing. Katrin Becker (Prof. Busch)

Dechema-Studentenpreis 2008, Fachgebiet Technische Chemie; Anerkennung für ihr besonders effizientes Studium mit hervorragendem Abschluss

Preis der Vereinigung von Freunden der TU Darmstadt e.V. für ihre ausgezeichnete wissenschaftliche Diplomarbeit *Modellierung der mikrostrukturellen Polymereigenschaften von Ethen-Vinylacetat-Copolymeren*

Dipl.-Ing. Benjamin Waldschmidt (Prof. Schäfer)

Buchpreis der Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie

Alarich-Weiss-Preis für hervorragende Diplomarbeiten am Ernst-Berl- und Eduard-Zintl-Institut

Dr.-Ing. Philip Kampe (Prof. Vogel)

Kurt-Ruths-Preis für die Dissertation *Selektivoxidation von Acrolein zu Acrylsäure an Mo/V/W-Mischoxiden – vom transienten Isotopenaustausch über die mathematische Modellierung zum Mechanismus*

PD Dr. Stefan M. Kast

1. Platz Posterpreis, 23. Molecular-Modelling-Workshop der Universität Erlangen-Nürnberg, April 2008, *Simulation of Ion Transport Through a Potassium Channel under Realistic Transmembrane Potentials in a Double Lipid Bilayer System*, M. Kreim, S. Tayefeh, G. Thiel, S.M. Kast

Top10 Hot Topic Poster-Preis, Bunsentagung, Saarbrücken, Mai 2008, *Quantum Chemistry in Solution by Combining 3D Integral Equation Theory with a Cluster Embedding Approach*, T. Kloss, J. Heil, S.M. Kast

Dr. Thomas Kloss (Dr. Kast)

Preis der Familie Bottling-Stiftung für seine herausragende Dissertation, Juni 2008

Dipl.-Ing. Kerstin Lehnert (Prof. Claus)

Young Scientist Award (International Congress on Catalysis, Korea, Juli 2008) für ihre durch die Faudi-Stiftung geförderten Forschungsarbeiten zur Erzeugung von Wasserstoff aus Glycerin durch Reformieren in wässriger Lösung mit Hilfe von Platin-Katalysatoren.

Dr. Christina M. Thiele

Habilitandenpreis der ADUC (Arbeitsgemeinschaft Deutscher Universitätsprofessoren für Chemie) für ihre originellen wissenschaftlichen Arbeiten auf dem Gebiet der mehrdimensionalen Kernresonanz-Spektroskopie, März 2008

Preis der Adolf-Messer-Stiftung 2008 zur Förderung von Forschung und Lehre

Preisträger der Dr. Anton-Keller-Stiftung für die besten Vor-und Hauptdiplom-Abschlüsse

Rene Eckert (Vordiplom), Sebastian Fabritz (Diplom, Prof. Kolmar), Tim Heiseler (Diplom, Prof. Kolmar), Lars Henrik Peeck (Diplom, Prof. Plenio), Marco Schütz (Diplom, Prof. Rehahn)

16. Beteiligung an laufenden Verbundprojekten

Name des Verbunds	Geldgeber	Teilnehmer
SFB 428: <i>Strukturierte Makromolekulare Netzwerke-systeme</i>	DFG	Biesalski, M.
<i>Mikro-Nano-Integration</i>	BMBF	Biesalski, M.
CO ₂ -DREAM-Reaktion	BMBF	Claus, P.
SFB 472: <i>Molekulare Bioenergetik; Teilprojekt P3: Supramolecular architecture of energy-transducing membrane protein complexes in chloroplasts and mitochondria</i>	DFG	Dencher, N.A.
EU FP6-2003-LifeSciHealth: Projekt N.A. Dencher: <i>Modulation of the mitochondrial proteome, OXPHOS supercomplex (respirasome) architecture, and activity during ageing by nutrition, free radicals, and exercise</i>	EU	Dencher, N.A.
GSI: <i>Induktion und Transmission von genetischen Schäden nach Hoch-LET Bestrahlung: In vivo und in vitro Untersuchungen</i>	BMBF	Dencher, N.A.
Wissenschaftliche und technische Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Neutronenstreuung	Helmholtz Zentrum Berlin	Dencher, N.A.
SFB 595: <i>Elektrische Ermüdung in Funktionswerkstoffen</i>	DFG	Dinse, K.P.
Exzellenzcluster Katalyse	UniCat, Berlin	Dinse, K.P.
SSP 1137: <i>Molekularer Magnetismus</i>	DFG	Haase, W.
Graduiertenkolleg 1037: <i>Tunable Integrated Components in Microwave Technology and Optics (TICMO)</i>	DFG	Haase, W.
SFB 595: <i>Elektrische Ermüdung in Funktionswerkstoffen, Teilprojekt B8: In situ Diagnostik von Interkalationsbatterien mittels Ramanspektroskopie</i>	DFG	Hess, C.
SPP 1177: <i>Directed Evolution to optimize and understand Molecular Biocatalysts</i>	DFG	Fessner, W.-D., Kolmar, H.
Bioindustrie 2021: <i>Entwicklung eines biotechnischen Prozesses zur Produktion makrocyclischer Ketone</i>	BMBF	Fessner, W.-D., Kolmar, H.
CM0701: <i>Cascade Chemoenzymatic Processes - New Synergies Between Chemistry And Biochemistry</i>	EU/COST	Fessner, W.-D.

Name des Verbunds	Geldgeber	Teilnehmer
<i>Biotechnologische Verfahren zur Identifizierung und Entwicklung neuer diagnostischer Tracer</i>	BMBF	Kolmar, H.
SPP 1155: <i>Molekulare Modellierung in der Verfahrenstechnik</i>	DFG	Müller-Plathe, F.
SPP 1191: <i>Ionische Flüssigkeiten</i>	DFG	Müller-Plathe, F.
SPP 1369: <i>Polymer-Festkörper-Kontakte: Grenzflächen und Interphasen</i>	DFG	Müller-Plathe, F.
Verbundprojekt PEM-FC; Komponenten: <i>Solvensfreie polymere Protonenleiter für den Einsatz als Separatormembranen in Brennstoffzellen oberhalb 100 °C (DryD)</i>	BMBF	Müller-Plathe, F.
CarboNet: <i>Kohlenstoffnanoröhren-Polymer-Komposite</i>	BMBF	Müller-Plathe, F.
Nanomodel: <i>Multi-Scale Modelling of Nano-Structured Polymeric Materials: From Chemistry to Materials Performance</i>	EU	Müller-Plathe, F.
<i>Organophile Nanofiltration für die nachhaltige Produktion in der Industrie</i>	BMBF	Plenio, H.
BioChance PLUS-2; Teilprojekt 2 TheraDerm: <i>Entwicklung und Validierung neuer Wirkstoffe zur Gewebe-Regeneration: Therapie chronischer Wunden und bakterieller Infektionen</i>	BMBF	Reggelin, M.
SSP 1179 <i>Organokatalyse</i>	DFG	Reggelin, M.
Forschergruppe 934: <i>NMR-Spektroskopische Bestimmung relativer und absoluter Konfigurationen gelöster Moleküle in orientierenden Medien</i>	DFG	Reggelin, M.
SFB 595: <i>Elektrische Ermüdung in Funktionswerkstoffen</i>	DFG	Rehahn, M
HMWK Loewe-AdRIA (Adaptronik-Research, Innovation, Application): <i>adaptives Auto, adaptiver Tilger</i>	LOEWE-AdRIA	Rehahn, M
SPP 1369 <i>Polymer-Festkörper-Kontakte; Teilprojekt: Segment Density and Coil Dimensions of Polymer Chains Anchored to Solid Surfaces</i>	DFG	Rehahn, M.

Name des Verbunds	Geldgeber	Teilnehmer
Verbundprojekt PEM-FC; Komponenten: <i>Solvensfreie polymere Protonenleiter für den Einsatz als Separator-membranen in Brennstoffzellen oberhalb 100 °C (DryD)</i>	BMBF	Rehahn, M.
Kompetenznetz Degenerative Demenzen (KNDD)	BMBF	Schmidt, B.
NeuroGSK3, <i>GSK3 in Neuronal Plasticity and Neurodegeneration: Basic Mechanisms and Pre-clinical Assessment</i>	EU	Schmidt, B.
Forschungsschwerpunkt <i>Nanomaterialien</i>	TUD	Schneider, J.J.
<i>Hybridstrukturen aus Phosphoolivinen des Typs LiMPO₄ mit C-Nanofilamenten für Li-Ionen-Batterien: Präparation, Eigenschaften und Anwendungspotenziale</i>	DFG	Schneider, J.J.
<i>Erhöhung der Duktilität von UHPC durch die Kombination von Fasern und nanoskalierten Partikeln</i>	DFG	Schneider, J.J.
Verbundprojekt MNI-CNTs; Förderungskonzept <i>Mikrosystemtechnik 2000+</i>	BMBF	Schneider, J.J.
Intensified Cooperation (IntenC): <i>Promotion of German-Turkish Higher Education Research</i>	BMBF	Schneider, J.J.
<i>Nano-Drucksensoren- Auf dem Weg zur taktilen künstlichen Haut. Ein nanostrukturierter Drucksensor auf der Basis von Kohlenstoffröhren</i>	LOEWE	Schneider, J.J.
SPP 1369 <i>Polymer-Festkörper-Kontakte: Grenzflächen und Interphasen; Projekt: Probing the Polymer/Solid Interface and Interphase in Mesostructured 2D-Carbon Nanotube/Polymer Composites: A Combined Study of Experiment and Theory</i>	DFG	Schneider, J.J.
Emmy-Noether-Nachwuchsgruppe: <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>Entwicklung einer neuen Downstreamprozesskette von biogenen Rohstoffen zu C2- und C4-Oxygenaten</i>	BMBF	Vogel, H.
<i>Erarbeitung der Verfahrensgrundlagen zur einstufigen Konversion von alkoholischen Fermenterausträgen zu den entsprechenden reinen Olefinen</i>	FNR	Vogel, H.

17. Kooperationen

Die von den einzelnen Arbeitsgruppenleitern benannten „bis zu 3 wichtigsten Kooperationspartner“ verteilen sich 2008 nach Art und Geographie wie folgt:

	Industrie	Akademisch	Gesamt
Darmstadt	4	3	7
Deutschland	10	21	31
Europa	2	9	11
Nordamerika, Australien, Japan	1	5	6
Welt	1	3	4
Gesamt	18	41	59
<u>In Prozent:</u>			
	Industrie	Akademisch	Gesamt
Darmstadt	6,8	5,1	11,9
Deutschland	16,9	35,6	52,5
Europa	3,4	15,2	18,6
Nordamerika, Australien, Japan	1,7	8,5	10,2
Welt	1,7	5,1	6,8
Gesamt	30,5	69,5	100,0

18. Veranstaltungen

von Mitgliedern des Fachbereichs (mit-)organisiert

Prof. Dr. B. Albert

Inorganic Materials 2008, Dresden, Elsevier, September 2008

Prof. Dr. P. Claus

Südwestdeutscher Katalyselehrverbund im Rahmen des DECHEMA-Kompetenznetzwerkes Katalyse ConNeCat, Wallerfangen/Saarland, April 2008

Prof. i.R. Dr. W. Haase

SPIE Photonics West, Program Committee Emerging Liquid Crystal Technologies III, San Jose, Januar 2008

Dr. R. Meusinger

Basiskurs NMR Spektrenauswertung, GDCh, Darmstadt, März 2008

Basiskurs NMR Spektrenauswertung, GDCh, Leverkusen, Mai 2008

Fortgeschrittenenkurs NMR Spektrenauswertung, GDCh, Leverkusen, Mai 2008

Fortgeschrittenenkurs NMR Spektrenauswertung, GDCh, Aachen, Juni 2008

NMR-Spektrenauswertung v. Mehrkomponentensystemen, GDCh, Darmstadt, August 2008

Prof. Dr. F. Müller-Plathe

ProcessNet International Workshop Molecular Modelling and Simulation in Applied Material Science, Dechema, Frankfurt, März 2008

Kickoff-Meeting des DFG Schwerpunkts 1369, Dechema, Frankfurt, Juni 2008

Workshop Theoretical Aspects of Ionic Liquids im Rahmen des DFG Schwerpunkts 1191, TU Darmstadt, Juni-Juli 2008

Rhein-Main Molecular Modelling Network, Summer School on Molecular Modelling, TU Darmstadt, August 2008

Prof. Dr. M. Reggelin

Experimentalvorlesung für Schüler, Merck-TUD/FB Chemie, Juni 2008

Prof. Dr. M. Rehahn (inkl. DKI)

1. VEF-DKI Industrieforum, Darmstadt, September 2008

17. DKI-Kolloquium, Darmstadt, April 2008

18. DKI-Kolloquium, Würzburg, August-September 2008

Arbeitskreis „Compoundieren“, Darmstadt, Oktober 2008

„Simulation“, Darmstadt, Oktober 2008

„Verschleiß in der Kunststoffverarbeitung“, Darmstadt, Oktober 2008

„Alterung und Korrosion von Kunststoffen“, Darmstadt, März 2008

„Lacke und Klebstoffe“, Darmstadt, Februar 2008

„Lacke und Klebstoffe“, Darmstadt, September 2008
DPI-Meeting, Darmstadt, September 2008

Prof. Dr. R. Schäfer

Netzwerktagung der Alexander von Humboldt-Stiftung, TU Darmstadt, Oktober 2008

Prof. Dr. J.J. Schneider

NANOTECHNIK Ringvorlesung, *Nano-Mikro-Makro: Grundlagen und Anwendungen hierarchisch strukturierter Materialien*, TU Darmstadt, Sommersemester 2008, Forschungsschwerpunkt Nanomaterialien

Prof. Dr. H. Vogel

Symposium zum 60. Geburtstag von Prof. Markwart Kunz (Südzucker AG), September 2008

Exkursion petrochemische Anlage des Ticona-Werkes (Celanese), Form-Ox, Trioxan, Dioxolan, POM-Polymerisation, Kelsterbach, Juni 2008

Projektierung einer 75 000 jato Blausäureanlage nach dem BMA-Verfahren, Exkursion Degussa Werk, Wesseling, März 2008

Fachexkursion zur Linde AG, Leuna und Dow, Olefinverbund, Schkopau, April 2008

Weiterbildungsveranstaltung Friedrich-Schiller-Universität Jena, Kohlenhydrate als Rohstoffe für die Chemische Industrie, Februar 2008

Dechema-Tagung: Industrielle Nutzung nachwachsender Rohstoffe, Chemische Konversion von Kohlenhydraten, Frankfurt a.M., Februar 2008

Exkursion Südzucker AG, Offstein, Oktober 2008

JungChemikerForum Darmstadt

2. JungChemikerForum (Vorsitz: C. Mehler): Vortragsreihe " Karriereberatung und Individuelles Bewerben für Chemiker/innen"

Workshop 1: Individuell Bewerben, 08. Mai 2008,

Workshop 2: Erfolgreich im Vorstellungsgespräch, 29. Mai 2008,

Workshop 3: Fit fürs Assessment Center (AC), 05. Juni 2008,

Workshop 4: Der Einstieg in den Job, 19. Juni 2008,

3. JungChemikerForum (Vorsitz: C. Mehler): Vortragsreihe "Chemie anders gedacht":

Vortragsreihe Dr. Andreas Woyke über „Die Deutung chemischer Phänomene im Kontext prozessphilosophischer Erwägungen“, TU Darmstadt, November 2008

19. Außenwirkung

Prof. Dr. B. Albert

Vorstandsmitglied der GDCh

GDCh Vorsitzende der Fachgruppe Festkörperchemie und Materialforschung

Merck – TUD - Juniorlabor

Dr.-Ing. H.-J. Bär

hobit, TUDay, Schnupperstudium

Prof. em. Dr. J. Brickmann

Wissenschaftlicher Leiter der Sustech, Darmstadt

Geschäftsführer der MOLCAD GmbH, Darmstadt

Wissenschaftlicher Direktor der SUCCIDIA AG, Darmstadt

Prof. Dr. M. Busch

ProcessNet-Fachausschuss für Hochdrucktechnik (Dechema)

Prof. Dr. P.Claus

Kommissionsmitglied der GeCatS (GermanCatalysisSociety)

Prof. Dr. P. Friedl

Beirat der CytoTools AG, Darmstadt

Prof. Dr. H. Kolmar

Mitglied des wissenschaftlichen Beirats der Firma Sloning, Puchheim

Dr. R. Meusinger

Merck-TUD Experimentalvorlesung für Schüler, Darmstadt

Experimentalvorlesung zum 60. Geburtstag von Prof. Kunz (Südzucker AG)

Weihnachtsvorlesung des Fachbereichs Chemie

Prof. Dr. F. Müller-Plathe

Vorsitzender des GDCh Ortsverbandes Darmstadt

Themenkommission der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie

Prof. Dr. M. Reggelin

Merck-TUD Experimentalvorlesung für Schüler, Darmstadt

Teilnahme und Organisation von Dreharbeiten im Rahmen des vom BMBF geförderten Projekts SOKNOS

Teilnahme am 3. Internationalen IT-Gipfel der Bundesregierung an der TU Darmstadt (Teilnahme der Bundeskanzlerin)

Prof. Dr. M. Rehahn

Gewählter AiF-Gutacher, Stellvertretender Vorsitzender der Gutachtergruppe 1 der AiF, Mitglied des Vorstandes des Wissenschaftlichen Rates der AiF, Mitglied des Vorstandes der Deutschen Kautschuk-Gesellschaft, Mitglied des Aufsichtsrates des FIZ Chemie Berlin, Technisch-Wissenschaftlicher Beirat eines Instituts der Helmholtz-Gemeinschaft, Mitglied des Technisch-Wissenschaftlichen Beirates eines Instituts der Leibniz-Gemeinschaft, Leiter des Deutschen Kunststoff Instituts (DKI)

Prof. Dr. R. Schäfer

Unterrichtskommission der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie

Prof. Dr. B. Schmidt

Medieninformation zum Studienprogramm IREP

Medienberichte und Interviews (FOCUS, Spiegel, FAZ) zur Publikation in Nature

Prof. Dr. J.J. Schneider

Vorstandsmitglied des Mikro-Nano Netzwerkes Rhein-Main

Fernsehbericht in rheinmaintv über den Nanotruck in Darmstadt

Dr. Dr. C.M. Thiele

Mitglied der GDCh Fachgruppe *Magnetische Resonanzspektroskopie*

Prof. Dr. H. Vogel

Vortragsveranstaltung am Immanuel-Kant-Gymnasium, Rüsselsheim

Nachwachsende Rohstoffe – Ein Weg aus der Öko-Krise?

Dr. K. Wannowius

Chemie für Schüler und Merck – TUD – Juniorlabor

19.1. Beratungstätigkeit für Firmen, Verbände etc.

Professoren Busch, Dinse, Kolmar, Meusinger, Müller-Plathe, Rehahn, Vogel

20. Laufende und geplante Forschungsvorhaben

Drittmittelanträge, Industriekooperationen

Prof. Dr. M. Busch

Basell, *Modellierung technischer Hochdruck-LDPE Reaktoren*

Evonik, *Kinetische Modellrechnungen zur Identifikation bzw. Eingrenzung von Reaktionsmechanismen hinsichtlich der von Röhm entwickelten Mercaptofüllung*

Faudi-Stiftung, *Kinetische Modellierung der Stabilität von Ethen-Mischungen im überkritischen Zustand*

Prof. Dr. P. Claus

EU-Projekt, *Glyceruse*

SYRAL, *Ethylenglycol production from renewable feedstocks*

BMBF-Verbundprojekt, *CO₂-DREAM Reaction*

Industrie, *Neue Edelmetallkatalysatoren für Abgasreinigung*

Stiftung, *Glycerolfolgechemie*

Prof. i.R. Dr. K.-P. Dinse

DFG, *Untersuchung von Kohlenstoffnanoröhren durch Innendotierung mit paramagnetischen Spinsonden*

Gastwissenschaftler im Exzellenzcluster UniCat, Berlin

Prof. Dr. W.-D. Fessner

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

EU/COST CM0701, *Cascade Chemoenzymatic Processes - New Synergies Between Chemistry And Biochemistry*

DFG-SPP1177, *Directed Evolution to Optimize and understand Molecular Biocatalysts*

EU-FP7 Marie Curie Initial Training Networks, *SynBioCat*

DFG ERA-NET Chemistry, *Enzyme-catalyzed synthesis of noncanonical amino acids related to threonine for bioorthogonal conjugations*

FNR-BMWi ERA-NET, *Multi-enzymatic processes (MULTIZYME)*

Prof. i.R. Dr. W. Haase

DFG GEPRIS-Projekt, *Investigations of agile nematic and ferroelectric liquid crystals for passive tunable microwave devices*

BMBF/ IB, *Neuere nanomagnetische Materialien für biomedizinische und katalytische Anwendungen*

BMBF, *Flüssigkristalline Nanokomposite*

Prof. Dr. C. Hess

LOEWE, *Materialium*

DFG-SFB595, *In situ Diagnostik von Interkalationsbatterien mittels Ramanspektroskopie*

PD Dr. S.M. Kast

SANOFI-AVENTIS, *Integral Equation Theory for Computing Free Energies: Application to Drug Design*

Prof. Dr. H. Kolmar

BMBF-Verbundprojekt Bioindustrie 2021, *Funktions- und strukturbasierte Aufreinigung und Analytik erhaltiger Chemikalien und Pharmaprodukte*

BMBF-Verbundprojekt, *Biotechnologische Verfahren zur Identifizierung und Entwicklung neuer diagnostischer Tracer*

DFG-SPP1177, *Directed Evolution to Optimize and understand Molecular Biocatalysts*

Prof. Dr. F. Müller-Plathe

DFG-Sonderforschungsbereich, *Kat@Sens*

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

DFG-SPP 1369, *The formation of a polymer interphase near a solid boundary during the curing of a reactive system, simulated by reactive molecular dynamics*

EU, *NanoModel - Multi-Scale Modelling of Nano-Structured Polymeric Materials: From Chemistry to Materials Performance*

EVONIK-DEGUSSA, *Modellierung von stabilisierten Suspensionen*

Prof. Dr. H. Plenio

BMBF, *Organophile Nanofiltration für die nachhaltige Produktion in der Industrie*

Prof. Dr. Reggelin

DFG SSP 1179, *Organokatalyse*

DFG Forschergruppe 934, *NMR-Spektroskopische Bestimmung relativer und absoluter Konfigurationen gelöster Moleküle in orientierenden Medien*

Prof. Dr. Schäfer

DFG GEPRIS-Projekt, *Elektrische Statische und dynamische Suszeptibilitäten von isolierten Molekülen und Clustern*

Prof. Dr. B. Schmidt

BMBF MINDE, *MOBItec Call*

EU RP7, *Neuro GSK3*

Prof. Dr. J.J. Schneider

DFG-Sonderforschungsbereich, *Kat@Sens*

DFG SCHN 375/20-1, *Probing the Polymer/Solid Interface and Interphase in Mesostructured 2D-Carbon Nanotube/Polymer Composites: A Combined Study of Experiment and Theory*

DST-DFG Kooperationsprogramm, Indo-German

LOEWE III, *Nanodrucksensoren*

Dr. C.M. Thiele

DFG Forschergruppe 934, *NMR-Spektroskopische Bestimmung relativer und absoluter Konfigurationen gelöster Moleküle in orientierenden Medien*

Prof. Dr. H. Vogel

LOEWE, *Urban Energies*

DFG, *Einfluss von Wasser auf den Wirkungsmechanismus und die Katalysatorstruktur bei Mo/V/W-Mischoxidkatalysierten Partialoxidation von Aldehyden*

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

BMBF, *Entw. einer neuen Downstreamprozesskette von biogenen Rohstoffen von C2 und C4 Oxigenaten*

Umicore, *Kinetische Charakterisierung von Abgaskatalysatoren*

EBAM Brand, *Einflüsse der Prozessparameter auf die Polymerisation von Acrylsäure und Acrylaten*

Max-Buchner-Stiftung, *Reaktionstechn. Untersuchungen zur Ethylenherstellung aus wässrigen Ethanollösungen*

21. Transfer von Forschungsleistungen in die Wirtschaft 2008

21.1. Bestehende Firmenausgründungen

Prof. em. Dr. J. Brickmann

Sustech GmbH & Co. KG, Darmstadt

MOLCAD GmbH, Darmstadt

Prof. Dr. W.-D. Fessner

Jennewein Biotechnologie GmbH, Rheinland-Pfalz

Prof. Dr. P. Friedl

CytoTools AG, Holding, Darmstadt

DermaTools Biotech GmbH, Pharma, Darmstadt

CytoPharma GmbH, Pharma/Biotech, Darmstadt

21.2. Dienstleistungen und Auftragsforschung

Prof. Dr. M. Busch

Versuche zur Zersetzung von Ethen, Ineos

Prof. Dr. P. Claus

Experimentelle Evaluierung einer Katalysatorbibliothek

Neuartiger solarmaterialbasierter Katalysator

Dr. R. Meusinger

NMR und IR Messungen

Prof. Dr. F. Müller-Plathe

Webseite für DFG Forschungsschwerpunkt 1199