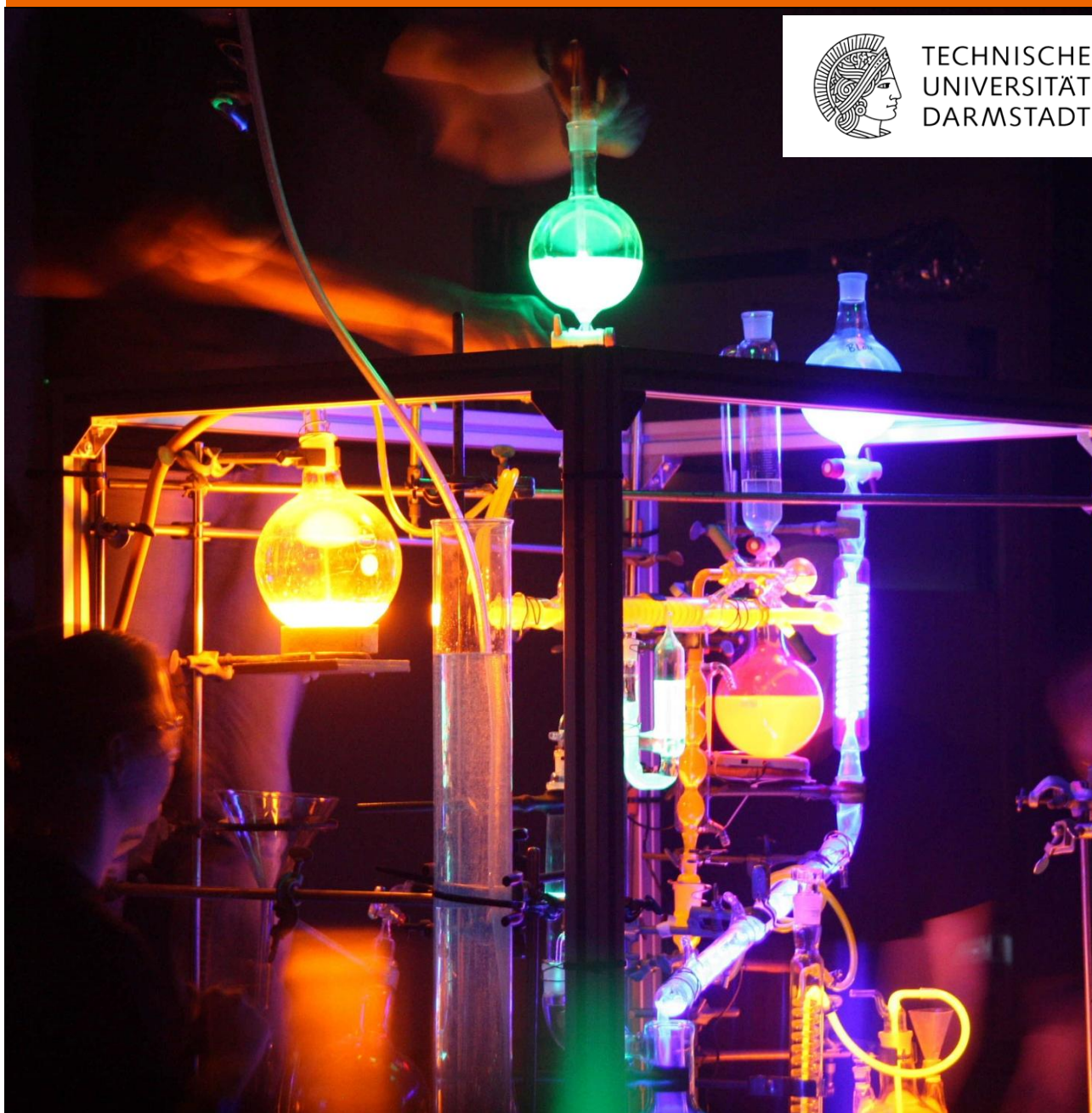


# Fachbereich Chemie

## Forschungsbericht 2010



TECHNISCHE  
UNIVERSITÄT  
DARMSTADT





## Impressum

### Herausgeber

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

### Redaktion

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

### Titelfoto

© PD Dr. Reinhard Meusinger

---

---

---

## 1. Inhaltsverzeichnis

---

1. Inhaltsverzeichnis.....	i
2. Chronik 2010 .....	3
3. Kurz-Statistik.....	5
4. Arbeitsgruppen-Kurzprofile.....	6
4.1. Clemens-Schöpf-Institut für Organische Chemie und Biochemie.....	6
4.1.1. Biochemie .....	6
4.1.2. Organische Chemie.....	6
4.2. Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie .....	7
4.2.1. Anorganische Chemie .....	7
4.2.2. Physikalische Chemie .....	8
4.3. Ernst-Berl-Institut für Technische und Makromolekulare Chemie .....	10
4.3.1. Technische Chemie.....	10
4.3.2. Makromolekulare Chemie.....	11
5. Habilitationen, Promotionen, Diplom-, Master- und Bachelorarbeiten 2010.....	12
5.1. Habilitationen .....	12
5.2. Promotionen .....	12
5.3. Diplom- und Masterarbeiten.....	14
5.4. Bachelorarbeiten.....	14
6. Ergangene Rufe und Verbleib der Alumni .....	15
6.1. Ergangene Rufe.....	15
6.2. Verbleib der Alumni .....	15
7. Kolloquiumsvorträge .....	16
7.1. Gesellschaft Deutscher Chemiker – Ortsverband Darmstadt.....	16
7.2. Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie .....	17
7.3. Clemens-Schöpf-Institut für Organische Chemie und Biochemie.....	19
7.4. Ernst-Berl-Institut für Technische Chemie und Makromolekulare Chemie.....	20
7.5. Deutsches Kunststoffinstitut .....	21
7.6. Ausgewählte Gastredner außerhalb der Kolloquien .....	24
8. Auswärtige wissenschaftliche Vorträge der Arbeitsgruppenmitglieder .....	27
9. Veröffentlichungen nach Arbeitsgruppen .....	29
9.1. Anorganische Chemie.....	29
9.2. Physikalische Chemie .....	32
9.3. Technische Chemie .....	37
9.4. Makromolekulare Chemie .....	39
9.5. Organische Chemie .....	40
9.6. Biochemie .....	43

---

10. Patente .....	45
10.1. Neuanmeldungen 2010 .....	45
10.2. Bestand an erteilten Patenten und Ersterteilungen 2010 .....	45
11. Herausgebertätigkeiten.....	46
12. Drittmittel .....	48
12.1. Ausgewiesene Drittmittel und Verteilung nach Geldgeber-Gruppen.....	48
12.2. Versteckte Drittmittel .....	48
12.3. Gesamte Drittmittel 2010.....	49
12.4. Neu eingeworbene Drittmittel .....	49
13. Stipendiaten und GastwissenschaftlerInnen am Fachbereich Chemie .....	50
14. Extern beschäftigte MitarbeiterInnen des Fachbereichs Chemie .....	52
15. Preise an Mitglieder des Fachbereichs 2010 .....	53
16. Beteiligung an laufenden Verbundprojekten .....	56
17. Kooperationen .....	59
18. Veranstaltungen .....	60
19. Außenwirkung.....	62
19.1. Beratungstätigkeit für Firmen, Verbände, etc. ....	65
20. Laufende und geplante Forschungsvorhaben .....	66
21. Transfer von Forschungsleistungen in die Wirtschaft 2010 .....	72
21.1. Bestehende Firmenausgründungen.....	72
21.2. Dienstleistungen und Auftragsforschung .....	72

---

## 2. Chronik 2010

---

Nun darf gerückt werden. Die lange angekündigte Sanierung der Chemiegebäude beginnt im F-Turm, wo Teile der Physikalischen und Technischen Chemie und das Dekanat untergebracht sind. Die Betroffenen ziehen in ihre Zwischenquartiere um, und freuen sich, dass sie weit vom Lärm der Abriss- und Betonsanierungsmaschinerie weg sind. Die im D- und E-Turm Zurückgebliebenen leiden für ein paar Monate.

In diesem Jahr werden bei den Professuren keine Änderungen wirksam. Zwar erhält Prof. van der Vegt einen Ruf auf eine W3-Stellen in Konstanz, doch kann dieser abgewehrt werden. Ein besonderer Fall ist Dr. Christina Thiele, die sich in diesem Jahr habilitiert, den Hans-Maier-Leibniz-Preis und einen ERC Starting Grant erhält und einen Ruf auf eine W3-Professur in Bremen. Mit diesen Leistungen werden zur Abwehr des Rufs sehr kurzfristig die Mittel für eine zusätzliche Professur bereitgestellt und eine ad personam Berufung eingeleitet. Nach Abschluss der Verhandlungen in 2011 nimmt Frau Dr. Thiele den Ruf an die TU Darmstadt an. Dr. Eckhart Rikowski, Geschäftsführer im Forschungsschwerpunkt Nanomaterialien bei Prof. Schneider, nimmt einen Erstruf auf eine Professur an der FH Südwestfalen in Iserlohn an.

Die herausragendste und sichtbarste Veränderung in der Forschung ist die Einwerbung des LOEWE-(Hessische Landesexzellenzinitiative)-Schwerpunkts *Soft Control* durch Prof. Biesalski. Damit ist zum ersten Mal seit mehreren Jahren ein standortgebundenes Verbundprojekt unter Federführung des Fachbereichs Chemie an die TU Darmstadt geholt worden. *Soft Control* erforscht polymermodifizierte Oberflächen, die durch externe Stimuli in ihren Eigenschaften reversibel geschaltet werden können. Aus der Chemie sind die Arbeitsgruppen Biesalski, Buntkowsky, Müller-Plathe, Rehahn, Reggelin und Thiele beteiligt, daneben Stühn (Physik), Thiel (Biologie) und Meyer-Almes (Hochschule Darmstadt).

Auch auf Seiten der Lehre ändert sich einiges. Die Anfängerzahlen sind in den letzten Jahren stark gestiegen. Für den Studiengang Bachelor Chemie wird ein Eignungsfeststellungsverfahren eingeführt. Eine Zulassung bekommt nur, wer in diesem Verfahren eine Mindestpunktzahl erhält, die sich aus gewichteten Abiturnoten und dem persönlichen Eindruck bei einem 30minütigen Gespräch zusammensetzt. Hier zieht der Chemie-Studiengang anderen (z.B. Maschinenbau, Biomolecular Engineering) nach, die solche Verfahren zum Teil seit Jahren einsetzen. Quantitative Ergebnisse liegen so schnell nicht vor, doch vorläufige erste Eindrücke legen nahe, dass die durchschnittliche Studienmotivation in diesem Jahrgang höher und die Abbrecherquote niedriger ist. Die in den letzten Jahren eingeleiteten Maßnahmen zur Verbesserung der Lehre, die durch Studiengebühren und später durch zusätzliche Landesmittel zur Qualitätssicherung in der Lehre sowie ein erhebliches persönliches Engagement zahlreicher Mitarbeiter möglich wurden, schlagen sich in der äußeren Wahrnehmung nieder: nach einer Umfrage der Wirtschaftswoche liegen die Absolventen der Naturwissenschaften aus Darmstadt erstmals in der Beliebtheit bei den Personalentscheidern vor denen aus Heidelberg.

Auch in diesem Jahr finden große Veranstaltungen am Fachbereich statt, unter anderem das 1. Darmstädter Papierchemiekolloquium mit 80 Teilnehmern, das im 2-Jahresturnus wiederholt werden soll.



Foto: Nik Schölzel/Forschungsschwerpunkt Biophotonik

Bundesforschungsministerin Schavan lässt sich auf dem Symposium des Forschungsschwerpunkts Biophotonik den Retina-Scanner zur Alzheimer-Diagnostik erklären. Zu dessen Entwicklung ist am Konsortium Prof. Boris Schmidt beteiligt (im Bild hinter Frau Schavan).

Außer Frau Dr. Thiele erhielten auch viele andere Fachbereichsmitglieder Preise und Ehrungen, z.B. Prof. Berger die „Outstanding Young German Scientist Award Lectureship“ 2011 vom Lise Meitner-Minerva Center for Computational Quantum Chemistry. Besonders freut es den Fachbereich, dass seine Dekanin Prof. Barbara Albert als Vizepräsidentin der Gesellschaft Deutscher Chemiker gewählt wird. Ach ja: und in diesem Jahr geht erstmalig ein Prodekan am Fachbereich Chemie für ein paar Monate in Elternzeit.

(Florian Müller-Plathe, Prodekan)

---

### 3. Kurz-Statistik

---

#### Menschen

Am 31.12.2010 waren in den Arbeitsgruppen am Fachbereich Chemie und im Chemie-bezogenen Teil des Deutschen Kunststoffinstituts 326 Personen tätig. Von diesen waren

20	Professoren
7	emeritierte/pensionierte Professoren (aktiv)
160	Doktoranden
39	Post-Doktoranden
3	Habilitanden
18	wissenschaftl. tätige Administrativ-Technische Mitarbeiter
117	Frauen
47	international (Hochschulabschluss im Ausland)
8	Stipendiaten (Emmy-Noether, Heisenberg, Humboldt, DAAD, Stiftungen, andere Quellen)
142	nicht durch TU-Stellen (Landesstellen) finanziert

#### Veröffentlichungen

Am Fachbereich und DKI entstanden 2010 184 neue Veröffentlichungen, davon 140 in begutachteten Fachzeitschriften, sowie 11 Patente. Die Veröffentlichungen der Professoren und Gruppenleiter wurden 2010 insgesamt 5907mal in der Literatur zitiert. Der mittlere H-Index der aktiven Professoren betrug 20,5. Einzelne Mitglieder des Fachbereichs wirkten als Editoren oder Board Members bei insgesamt 17 Zeitschriften.

#### Drittmittel (ohne Deutsches Kunststoffinstitut)

Im Jahr liefen 99 Drittmittelprojekte (mit jeweils einem Personenjahr oder mehr Gesamtdauer). Mitglieder des Fachbereichs Chemie waren an laufenden Verbundprojekten (davon 12 DFG-Sonderforschungsbereiche, -Schwerpunkte, -Graduiertenkollegs, 14 BMBF-Verbünde, 2 EU-Verbünde, 3 LOEWE und 7 weitere Verbünde) beteiligt. Im Jahr 2010 wurden Zusagen (Zuwendungsbescheide, Verträge) über etwa 7,3 Mio. € neu akquiriert.

#### Vorträge

141 externe Sprecher haben in der Chemie oder am DKI vorgetragen, davon 52 in den Kolloquien der Institute oder der Gesellschaft Deutscher Chemiker, Ortsverband Darmstadt. Umgekehrt haben Mitglieder des Fachbereichs ca. 127 Vorträge auswärts gehalten.

#### Konferenzen, Workshops, Sommerschulen

Mitglieder des Fachbereichs haben 2010 selbst 33 Veranstaltungen organisiert oder mitorganisiert.

#### Wissenschaftlicher Nachwuchs

2010 wurden 28 Bachelorarbeiten (6 Frauen; 22 Männer), 28 Diplomarbeiten (14 Frauen; 14 Männer) und 34 Promotionen (15 Frauen; 19 Männer) am Fachbereich Chemie sowie eine Habilitation (Dr. Christina Marie Thiele, OC) abgeschlossen. Hinzu kommen 3 Masterarbeiten, 12 Diplomarbeiten und 1 Promotion an anderen Fachbereichen und Universitäten.

---

## 4. Arbeitsgruppen-Kurzprofile

---

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

#### 4.1.1. Biochemie

##### **Prof. Dr. Norbert A. Dencher**

Forschungsschwerpunkte der Arbeitsgruppe Physikalische Biochemie sind (a) die Biochemie des Alterns (Integrated Project MiMage „Role of mitochondria in conserved mechanisms of ageing“ der EU), (b) die Untersuchung der Struktur von Membranen und Membranproteinen mittels Neutronenstreuung. An einem eigenen Diffraktometer am Helmholtz-Zentrum Berlin erfolgen die Strukturuntersuchungen, einschließlich der Lokalisation von funktionell wichtigen Wassermolekülen. Die Dynamik von Membranen und Wasser wird charakterisiert mittels quasielastischer Neutronenstreuung im Zeitfenster von Femto- bis Nanosekunden. Weitere Schwerpunkte der Arbeiten sind die Untersuchung (c) molekularer Prozesse der Alzheimer-Demenz und (d) die Strahlenwirkung auf Zellen.

[www.chemie.tu-darmstadt.de/dencher](http://www.chemie.tu-darmstadt.de/dencher)

##### **Prof. Dr. Peter Friedl**

In der Arbeitsgruppe werden Bereiche der Zellkulturtechnik wie Herstellung geeigneter Zelllinien für die Wirkstoffforschung und Entwicklung definierter Medien bearbeitet. Ein weiteres Forschungsfeld befasst sich mit der Wirkung mechanischer Kräfte auf die Physiologie wichtiger primärer Zellen wie vaskulärer Endothelialzellen und Fibroblasten zur Identifizierung therapierelevanter Zielmoleküle.

##### **Prof. Dr. Harald Kolmar**

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

[www.chemie.tu-darmstadt.de/kolmar](http://www.chemie.tu-darmstadt.de/kolmar)

#### 4.1.2. Organische Chemie

##### **Prof. Dr. Robert Berger**

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

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

##### **Prof. Dr. Wolf-Dieter Fessner**

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

[www.oc.chemie.tu-darmstadt.de/index.php?bookmark=ak/fessner/index](http://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.

[hactar.oc.chemie.tu-darmstadt.de/home](http://hactar.oc.chemie.tu-darmstadt.de/home)

### **Prof. Dr. Michael Reggelin**

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

[deephought.oc.chemie.tu-darmstadt.de](http://deephought.oc.chemie.tu-darmstadt.de)

### **Prof. Dr. Boris Schmidt**

Die Arbeitsgruppe ist fokussiert auf die Entwicklung von Enzyminhibitoren und Diagnostika für Alzheimer-Demenz. Die Forschung beinhaltet Targetidentifizierung und -validierung, aber auch *hit-to-lead* Programme, Lead-Optimierung und *proof-of-concept* Studien. Die chemisch-präparativen Schwerpunkte sind: 1- und 2-Photonenfluoreszenzfarbstoffe, Enzyminhibitoren für Sekretasen und Kinasen (GSK3, CK1) und  $\beta$ -Faltblattliganden.

[www1.tu-darmstadt.de/fb/ch/Fachgebiete/OC/AKSchmidt/TUD%20Boris%20Schmidt.htm](http://www1.tu-darmstadt.de/fb/ch/Fachgebiete/OC/AKSchmidt/TUD%20Boris%20Schmidt.htm)

### **PD Dr. Christina M. Thiele - Emmy-Noether-Nachwuchsgruppe**

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

[www.chemie.tu-darmstadt.de/thiele](http://www.chemie.tu-darmstadt.de/thiele)

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

### **4.2.1. Anorganische Chemie**

#### **Prof. Dr. Barbara Albert**

In der Arbeitsgruppe werden Anorganische Festkörper und Materialien synthetisiert und bezüglich ihrer Kristallstruktur, ihrer elektronischen Struktur und ihrer chemischen und physikalischen Eigenschaften untersucht. Bei den zurzeit im Fokus stehenden Substanzklassen handelt es sich beispielsweise um Boride (Thermoelektrika), Cuprate (Supraleiter), Titanate (Pigmente), Phosphate (Lumineszenzmaterialien) oder Thermoelektrika (Zintl-Phasen).

[www.chemie.tu-darmstadt.de/albert](http://www.chemie.tu-darmstadt.de/albert)

#### **Prof. Dr. Herbert Plenio**

Der Forschungsschwerpunkt liegt primär auf der Methodenentwicklung in der homogenen Katalyse. Dabei stehen die Ruthenium-vermittelte Olefin-Metathese sowie Palladium-vermittelte Kreuzkupplungsreaktionen im Zentrum der Forschung.

[www.chemie.tu-darmstadt.de/plenio](http://www.chemie.tu-darmstadt.de/plenio)

---

### **Prof. Dr. Jörg J. Schneider**

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

[www.chemie.tu-darmstadt.de/schneider](http://www.chemie.tu-darmstadt.de/schneider)

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

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

[www1.tu-darmstadt.de/fb/ch/Fachgebiete/AC/AKKlein/index.tud](http://www1.tu-darmstadt.de/fb/ch/Fachgebiete/AC/AKKlein/index.tud)

## **4.2.2. Physikalische Chemie**

### **Prof. i.R. Dr. Jürgen Brickmann**

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

[www.molcad.com](http://www.molcad.com)

### **Prof. Dr. Gerd Buntkowsky**

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

[www.tu-darmstadt.de/fb/ch/akbuntkowsky](http://www.tu-darmstadt.de/fb/ch/akbuntkowsky)

### **Prof. i.R. Dr. Wolfgang Haase**

Die Forschungsschwerpunkte liegen in der Untersuchung der Displaytauglichkeit von Ferroelektrischen Flüssigkristallen (liquid crystals LC) sowie das Verhalten der LC-Nanokolloide im Mikrowellengebiet und die Elektrophorese anisotroper Medien. Weiterhin wird magnetische Zirkulardichroismus-Spektroskopie bei variablen Feld (bis 9 T) und variabler Temperatur (VHVT-MCD) an bioanorganisch relevanten Systemen durchgeführt und eine Modellierung der magnetischen Suszeptibilitätsverläufe und der Magnetisierung von Systemen mit großer Spin-Bahnkopplung wie z.B. Co(II); Single Chain Magnets.

[www.tu-darmstadt.de/haase](http://www.tu-darmstadt.de/haase)

---

### **Prof. Dr. Christian Hess**

Die Forschungsfelder liegen in der Oberflächenchemie von Nanomaterialien, heterogenen Katalyse, Sensorik, Batterieforschung und in situ- und operando-Spektroskopie. Neue funktionalisierte, nanostrukturierte Materialien werden entwickelt und als Modellsysteme eingesetzt, um mittels spektroskopischer Verfahren (Raman, UV-Vis, XPS) die Wirkungsweise von Katalysatoren (Partialoxidationen, NO<sub>x</sub>-Speicherung), Metalloxidsensoren sowie Li-Ionen-Batterien zu untersuchen.

[www.chemie.tu-darmstadt.de/hess](http://www.chemie.tu-darmstadt.de/hess)

### **Prof. Dr. Florian Müller-Plathe**

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

[www.chemie.tu-darmstadt.de/mueller-plathe](http://www.chemie.tu-darmstadt.de/mueller-plathe)

### **Prof. Dr. Rolf Schäfer**

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

[www.chemie.tu-darmstadt.de/schaefer](http://www.chemie.tu-darmstadt.de/schaefer)

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

Die Arbeitsgruppe Computergestützte Physikalische Chemie beschäftigt sich mit molekularen Simulationen und Multiskalenmodellierung von komplexen Systemen. Der Forschungsschwerpunkt liegt auf Polymeren an Grenzflächen (z.B. funktionelle Polymeroberflächen, Polyelektrolyte an Mineraloberflächen), Grenzflächen zwischen einer festen und fluiden Phase (Benetzung, Wärmeübertragung), Thermodynamik von wässrigen Lösungen (Solvatisierungsphänomene) und molekularer Transport gelöster Moleküle/Additive in Polymersystemen.

[www.cpc.tu-darmstadt.de](http://www.cpc.tu-darmstadt.de)

---

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

### 4.3.1. Technische Chemie

#### Prof. Dr. Markus Busch

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

#### Prof. Dr. Peter Claus

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

#### Prof. em. Dr. Johann Gaube

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

#### Prof. Dr. Herbert Vogel

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit der selektiven Defunktionalisierung von nachwachsenden Rohstoffen mit Hilfe von Katalyse und Green Solvents (bevorzugt nah- und überkritisches Wasser), dem rationalen Katalysatordesign mittels *in situ* Methoden wie DRIFTS, TG/DTA-MS und instationären Kinetikmethoden wie temperatur- und konzentrationsprogrammierten Reaktionen sowie Isotopenaustauschmethoden.  
[www.ct.chemie.tu-darmstadt.de/ak\\_vogel](http://www.ct.chemie.tu-darmstadt.de/ak_vogel)

---

## 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. Das Interesse gilt hierbei der Grenzflächenfunktionalisierung biologischer/biosynthetischer Materialien sowie der Modifikation von anorganischen und organischen Substratoberflächen. In anwendungsnahen Arbeiten beschäftigt sich die Arbeitsgruppe mit biomedizinischen/biosensorischen Oberflächen (z.B. Zellchips) sowie der Entwicklung von neuartigen, funktionalen Papieren und Papierbeschichtungen.

[www.chemie.tu-darmstadt.de/map/index/map\\_group\\_main/home\\_1.en.jsp](http://www.chemie.tu-darmstadt.de/map/index/map_group_main/home_1.en.jsp)

### **Prof. Dr. Matthias Rehahn**

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

[www.chemie.tu-darmstadt.de/rehahn](http://www.chemie.tu-darmstadt.de/rehahn)

### **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](http://www.dki.tu-darmstadt.de)

---

---

## 5. Habilitationen, Promotionen, Diplom-, Master- und Bachelorarbeiten 2010

---

Zeitraum 01.01.2010 – 31.12.2010

### 5.1. Habilitationen

**Dr. rer. nat. Christina Marie Thiele** (Fachgebiet Prof. Dr. M. Reggelin), *Residuale Dipolare Kopplungen (RDCs) als neuartige NMR-Parameter in der Strukturaufklärung organischer Verbindungen*. Habilitation im Fach Organische Chemie am 01.03.2010.

### 5.2. Promotionen

Gesamt: 34 Abschlüsse (Frauen: 15, Männer: 19) an der TU Darmstadt und 1 Abschluss (m) an einer anderen Universität

**Algaer, Elena**, *Thermal Conductivity of Polymer Materials: Reverse Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations*, Prof. Müller-Plathe (PC), März 2010

**Alaghemandi, Mohammed**, *Thermal Conductivity and Thermal Rectification in Carbon Nanotubes: Reverse Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations*, Prof. Müller-Plathe (PC), März 2010

**Alber, Anne**, *In-situ-DRIFTS-Untersuchung der Müller-Rochow-Synthese*, Prof. Vogel (TC), Juni 2010

**Aras, Gökhan**, *Chemie in überkritischen Fluiden*, Prof. Vogel (TC), Mai 2010

**Arras, Jürgen**, *Wirkungsweise ionischer Flüssigkeiten auf Metall/Trägerkatalysatoren für die Hydrierung von Citral*, Prof. Claus (TC), Mai 2010

**Becker, Katrin**, *Modellierung der mikro-strukturellen Eigenschaften von Ethen-Vinylacetat-Co- und Ter-Polymeren*, Prof. Busch (TC), Oktober 2010

**Bennour, Hamdi A.M.**, *Synthesis, Reactions and Properties of Iron, Cobalt and Nickel Complexes Containing some [P, S]-chelating Ligands and Trimethylphosphine*, Prof. Klein (AC), Februar 2010

**Brandner, Armin**, *Von gelben Feldern zu Grüner Chemie. Über die Selektive Desaktivierung bei der Oxidation von Glycerol zu Dihydroxyaceton an Platin-Bismut-Katalysatoren*, Prof. Claus (TC), Juli 2010

**Dahm, Pia**, *Metabolic engineering der Taxolbiosynthese in Saccharomyces cerevisiae*, Prof. Fessner (OC), Dezember 2010

**Daneschdar, Matin**, *Neue Wege zur rekombinanten Oligomerisierung von Peptiden und Proteinen*, Prof. Kolmar (BC), November 2010

**Gallei, Markus**, *Synthese funktionaler Metallo-Blockcopolymerer*, Prof. Rehahn (MC), November 2010

**Griebel, Arndt**, *Zur Rolle der Silberoxide bei der heterogen katalysierten Epoxidation von Ethylen*, Prof. Vogel (TC), Januar 2010

---

**Gutmann, Torsten**, *Para-Wasserstoff als molekulare Sonde zur Empfindlichkeitssteigerung in der Magnetischen Resonanz*, Prof. Buntkowsky (PC), FSU Jena, Juli 2010

**Höttecke, Nicole**, *Entwicklung und Synthese von  $\alpha$ -Sekretase-Modulatoren zur Behandlung von Morbus Alzheimer*, Prof. Schmidt (OC), Februar 2010

**Joshi, Ravi K.**, *Synthesis, alignment, growth mechanism and functional properties of carbon nanotubes and their hybrid materials with inorganic and biomaterials*, Prof Schneider (AC), November 2010

**Kaiser, Jan Philipp**, *Synthese C1- und C2-symmetrischer Sulfoximinliganden für die asymmetrische Katalyse*, Prof Reggelin (OC), Februar 2010

**Klimczak, Margarethe**, *Entwicklung und Anwendung einer Technologie zur Untersuchung der chemischen Desaktivierung von SCR-Katalysatoren durch anorganische Gifte*, Prof. Claus (TC), Mai 2010

**Koolman, Hannes**, *Synthese neuartiger N-Heterocyclen als Template für Kinase-Inhibitoren*, Prof Reggelin (OC), Dezember 2010

**Kohl, Sabine**, *Oberflächenoxide auf kohlenstoffbasierten Materialien*, Prof. Vogel (TC), Juni 2010

**Mass, Valentina**, *Strukturaufklärung komplexer Polymere mittels MALDI-CID-MS*, Prof. Pasch (MC), Oktober 2010

**Neumann, Christopher**, *Darstellung aromatischer Monomere auf Basis von 5-Hydroxymethylfurfural*, Prof. Rehahn (MC), November 2010

**Nordt, Sawa**, *Analytik von Novolak-Epoxidharzen für die Resistentwicklung in der Mikrosystemtechnik*, Prof. Pasch (MC), Oktober 2010

**Otte, Tino**, *Charakterisierung von ultrahochmolekularen Polyolefinen mit Asymmetrischer Fluss-Feldflussfraktionierung und Größenausschlusschromatographie*, Prof. Pasch (MC), April 2010

**Pashchanka, Mikhail**, *Templatgesteuerte Synthese und Anordnung eindimensionaler keramischer Materialien*, Prof Schneider (AC), Juli 2010

**Preuß, Michael**, *Konstitutionelle Defekte in Poly(p-phenylenvinyl)en aus Heck- und Suzuki-Polykondensation*, Prof. Rehahn (MC), Juli 2010

**Rossinsky Eduard**, *Molecular Simulation of Transport in Liquids and Polymers*, Prof. Müller-Plathe (PC), Januar 2010

**Roth, Marion**, *Neue Konzepte in der Hochdruck-Polyethylensynthese*, Prof. Busch (TC), April 2010

**Schilling, Thorsten**, *Eisen-Stickstoff-modifizierte, mehrwandige Kohlenstoffnanoröhren für die elektrokatalytische Reduktion von Sauerstoff*, Prof. Claus (TC), Juli 2010

---

**Schokraie, Elham**, *Investigating the Proteome of Tardigrades: Towards a better Understanding of Molecular Mechanisms during Anhydrobiosis*, Prof. Dencher (BC), November 2010

**Schwaßmann, Helena**, *Analyse von Atmungskettenkomplexen aus Organellen von Chlamydomonas reinhardtii und Rattus norvegicus*, Prof. Dencher (BC), Mai 2010

**Traser, Birgit**, *Gaschromatographischer Nachweis von Carbonylverbindungen in der Atmosphäre – Untersuchungen zu Quellen und Senken*, Prof. Bächmann (AC), Oktober 2010

**Ugas Carrión, Ruperto A.**, *Investigation of Stabilizing Agents in Thin Sol-Gel Zirconium Oxide Anti-corrosion Coatings on Iron Materials*, Prof. Ensinger/Prof. Albert (AC), Oktober 2010

**Vorfalt, Tim**, *Olefinmetathese - Synthese und Mechanismus von Ruthenium-NHC-Komplexen*, Prof. Plenio (AC), Mai 2010

**Yoba-N'goma, Habib P.R.**, *Characterization of multiblock copolymers by chromatographie methods*, Prof. Pasch (MC), Februar 2010

**Zipf, Nina**, *Studien zur Synthese phosphanfunktionalisierter helical chiraler Polyisocyanate als Organokatalysatoren*, Prof. Reggelin (OC), Juli 2010

### 5.3. Diplom- und Masterarbeiten

Im Jahr 2010 wurden am Fachbereich Chemie insgesamt 28 Diplomarbeiten abgeschlossen (Frauen: 14, Männer: 14), die Zahl verteilt sich folgendermaßen auf die einzelnen Fachgebiete:

Anorganische Chemie:	3
Biochemie:	5
Makromolekulare Chemie:	5
Organische Chemie:	5
Physikalische Chemie:	4
Technische Chemie:	6

Hinzu kommen 12 Diplomarbeiten und 3 Masterarbeiten, die an anderen Fachbereichen und Universitäten abgeschlossen wurden.

### 5.4. Bachelorarbeiten

Im Jahr 2010 wurden am Fachbereich Chemie insgesamt 28 Bachelorarbeiten abgeschlossen (Frauen: 6; Männer: 22), die Zahl verteilt sich folgendermaßen auf die einzelnen Fachgebiete:

Anorganische Chemie:	4
Biochemie:	5
Makromolekulare Chemie:	6
Organische Chemie:	3
Physikalische Chemie:	4
Technische Chemie:	6



---

## 6. Ergangene Rufe und Verbleib der Alumni

---

### 6.1. Ergangene Rufe

**Dr. Eckhard Rikowski**, Fachgebiet Anorganische Chemie (Prof. Schneider), Ruf auf eine Professur für Chemie und Nanotechnologie an die Fachhochschule Südwestfalen.

**PD Dr. Christina M. Thiele**, Fachgebiet Organische Chemie (Prof. Reggelin), Ruf auf eine W3-Professur für Instrumentelle Analytik, Universität Bremen; Dr. Thiele hat den Ruf nicht angenommen.

**Prof. Dr. Nico A. van der Vegt**, Fachgebiet Physikalische Chemie, Ruf auf eine W3-Professur für Theoretische Chemie, Universität Konstanz; Prof. van der Vegt hat den Ruf nicht angenommen.

### 6.2. Verbleib der Alumni

Von 31 erfassten Alumni (mehrheitlich Doktoranden, aber auch Post-Docs, Stipendiaten, etc.) fanden nach Verlassen der TU Darmstadt eine erste Beschäftigung in

Industrie	14
Wirtschaft, nicht Industrie	5
Akadem. Forschung	8
Verwaltung, Behörden	-
Elternzeit/arbeitslos/unbekannt	4

---

## 7. Kolloquiumsvorträge

---

### 7.1. Gesellschaft Deutscher Chemiker – Ortsverband Darmstadt

19. Januar 2010

**Prof. Dr. Reshef Tenne, Weizmann Institut, Rehovot, Israel**

*Inorganic nanotubes (INT) and fullerene-like structures (IF)*

02. Februar 2010

**Prof. Dr. Mario Thevis, Deutsche Sporthochschule, Köln**

*Manipulation im Sport: Nachweisverfahren in der Dopinganalytik*

20. April 2010

**Prof. Dr. Piet Kerkof, TU Eindhoven**

*Progress and challenges in multicomponent fluid transport theory*

04. Mai 2010

**Prof. Dr. Reinhard Nießner, TU München**

*Laser oder Antikörper – zwei starke Partner der analytischen Chemie*

01. Juni 2010

**Prof. Dr. Horst Weller, Universität Hamburg**

*Kleine Teilchen – große Wirkung: Nanopartikel in Material- und Lebenswissenschaften*

15. Juni 2010

**Prof. Dr. Volker Hessel, Institut für Mikrotechnik, Mainz**

*Nachhaltige Chemie durch neue Prozessfenster in der Mikroprozessertechnik*

15. Juni 2010

**Prof. Dr. Robert Berger, TU Darmstadt**

*Chiralität, Symmetrie und Quantenchemie*

29. Juni 2010

**Prof. Dr. Henning Hopf, TU Braunschweig**

*Wie entsteht Neues? – Innovation in der Chemie*

26. Oktober 2010

**Prof. Dr. Ralf Riedel, Fachbereich Material- und Geowissenschaften, TU Darmstadt**

*Synthesemethoden für Hochleistungskeramiken*

07. Dezember 2010

**Prof. Dr. Ingo Krossing, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg**

*Computerunterstützte Synthese von Ionischen Flüssigkeiten*

---

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

27. Januar 2010

**Prof. Dr. Karsten Reuter, Lehrstuhl Theoretische Chemie, TU München**

*First-principles based Multiscale Modeling Approaches to Surface Physics and Catalysis*

03. Februar 2010

**Prof. Dr. Klaus Rademann, Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin**

*Precious metal functionalized soda-lime silicate glass*

10. Februar 2010

**Prof. Dr. Wolfgang Meier, Fachbereich Chemie, Universität Basel, Schweiz**

*Biomimetische Blockcopolymer – Membranen*

17. Februar 2010

**Univ. Doz. DI Dr. Christian Slugovc, MSc, Institute for Chemistry and Technology of Organic Materials, Graz University of Technology**

*Olefin Metathese Polymerisation – Initiatoren, Mechanismen, Materialien*

21. April 2010

**Dr. Wolfgang Christen, Physikalische und Theoretische Chemie III, Humboldt Universität Berlin**

*Supersonic Beams at High Particle Densities*

05. Mai 2010

**Dr. Detlev Schoof, Institut für Nanotechnologie, KIT, Forschungszentrum Karlsruhe**

*Bestimmung der Strukturen von Metallclusterionen durch Trapped Ion Electron Diffraction*

19. Mai 2010

**Prof. Dr. Hermann E. Gaub, Angewandte Physik, Ludwig-Maximilians Universität München**

*DNA: Ein programmierbarer Kraftsensor für nanoskalige Konstrukte*

02. Juni 2010

**Prof. Dr. Elena R. Savinova, Ecole de Chimie, Polymères, Matériaux de Strasbourg, Université de Strasbourg**

*Novel approaches to the design of the catalytic layers for low temperature fuel cells*

09. Juni 2010

**Prof. Dr. Gernot Friedrichs, Institut für Physikalische Chemie, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel**

*Physikochemische Aspekte der Kopplung von Ozean und Atmosphäre: VSFG-Spektroskopie an der Wasser-Luft-Grenzfläche*

16. Juni 2010

**Prof. Dr. Klaus Weisz, Institut für Biochemie, Ernst-Moritz-Arndt Universität Greifswald**

*Thermodynamische und NMR-strukturelle Untersuchungen zur DNA-Erkennung*

---

21. Juni 2010

**Dr. Tanusri Saha-Dasgupta, Bose National Centre, Calcutta**

*Fascinating World of Double Perovskites*

22. Juni 2010

**Prof. Dr. Prathap Haridoss, Department of Metallurgical and Materials Engineering IIT Madras, Chennai**

*Effect of cyclic compression on the structure and property of gas diffusion layers for PEM fuel cells*

30. Juni 2010

**Prof. Dr. Ram Seshadri, Materials Research Laboratory, University of Santa Barbara, USA**

*Applying solid state chemistry to developing and understanding new catalysts and phosphors*

25. August 2010

**PD Dr. Diana Imhof, Zentrum für Molekulare Biomedizin, Institut für Biochemie, Friedrich-Schiller-Universität Jena**

*Synthetically challenging and biologically interesting molecules: Phosphopeptides, Peptide mimetics, disulfides, cyclic peptides, and more*

01. Oktober 2010

**Prof. Dr. Carlos G. Levi, Materials Department, University of California, Santa Barbara, USA**

*The challenge of designing thermal barrier coatings for improved performance and durability*

17. November 2010

**Prof. Dr.-Ing. Matthias Oechsner, Staatl. Materialprüfungsanstalt Darmstadt, Institut für Werkstoffkunde, TU Darmstadt**

*Werkstoffe für stationäre Gasturbinen zur Energieerzeugung – Status und zukünftige Herausforderung*

24. November 2010

**Prof. Dr. Joachim Bill, Max-Planck-Institut für Metallforschung Stuttgart und Institut für Materialwissenschaften der Universität Stuttgart**

*Bioinspirierte Synthese anorganischer Funktionsmaterialien*

15. Dezember 2010

**Prof. Dr. Manfred Martin, Institut für Physikalische Chemie, RWTH Aachen**

*Wilhelm-Jost-Gedächtnis-Vorlesung*

*Diffusion und chemische Reaktion in festen Stoffen*

---

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

11. Januar 2010

**Prof. Dr. Joachim Thiem, Universität Hamburg**

*Aufbau bioaktiver Glycostrukturen durch chemoenzymatische Glycosylierungen*

25. Januar 2010

**Prof. Dr. Pere Clapés, Catalonia Institute for Advanced Chemistry, Barcelona**

*Enzyme Catalyzed Asymmetric Aldol Additions: Iminosugars from DHAP to unphosphorylated donor analogues*

01. März 2010

**Dr. Christina M. Thiele, Institut für Organische Chemie und Biochemie, TU Darmstadt**

*Asymmetrische Autokatalyse – Bermerkenswerte Beispiele chiraler Amplifikation*

22. April 2010

**Prof. Dr. Rainer Bischoff, University of Groningen**

*Activity-based profiling of metalloproteases: a chemical proteomics approach*

10. Mai 2010

**Prof. Dr. Stefan Hecht, Ph. D., Humboldt-Universität, Berlin**

*Photoswitches to Control Molecular Systems*

17. Mai 2010

**Prof. Dr. Andreas Jäschke, Institut für Pharmazie und Molekulare Biotechnologie, Heidelberg**

*Nucleic Acids as Catalysts and Regulators*

07. Juni 2010

**Dr. Axel Jacobi von Wangelin, Institut für Organische Chemie, Universität zu Köln**

*Eine Spielwiese für Katalysatoren: Synthesen funktionalisierter Carbocyclen für biologische, materialwissenschaftliche und synthetische Anwendungen*

14. Juni 2010

**PD Dr. Christina M. Thiele, Institut für Organische Chemie und Biochemie, TU Darmstadt**

*Residuale Dipolare Kopplungen – die Wasserwaage der organischen Strukturbestimmungen*

16. Juni 2010

**Dr. Sergio Riva, Istituto di Chimica del Riconoscimento Molecolare, Mailand**

*Laccase-Catalyzed Oxidation of Natural Compounds*

21. Juni 2010

**PD Dr. Martin Karpf, F. Hoffmann – La Roche Ltd., Basel**

*From Milligrams to Tons: The Importance of Synthesis & Process Research in the Development of new Drugs*

---

05. Juli 2010

**Prof. Dr. Thorsten Bach, Department Chemie, Technische Universität München**

*Neue stereoselektive Methoden und ihre Anwendung in der Synthese komplexer Naturstoffe*

25. August 2010

**PD Dr. Diana Imhof, Zentrum für Molekulare Biomedizin, Institut für Biochemie, Friedrich-Schiller-Universität Jena**

*Synthetically challenging and biologically interesting molecules: Phosphopeptides, Peptide mimetics, disulfides, cyclic peptides, and more*

01. November 2010

**Prof. Dr. Bernd J. Plietker, Institut für Organische Chemie, Universität Stuttgart**

*Nachhaltige Chemie – Beispiele aus der Katalyse und Wirkstoffsynthese*

15. November 2010

**Prof. Dr. Doris Kunz, Institut für Anorganische Chemie, Tübingen**

*Mono- und Multidentate N-Heterocyclic Carbene: (steuerbare?) Liganden für nucleophile Metallkatalysatoren*

29. November 2010

**Prof. Dr. Claudia Steinem, Georg-August-Universität, Göttingen**

*Crossing the barrier: Transport processes across pore spanning membranes*

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

12. Januar 2010

**Dipl.-Ing. Michael Sarlea, Procter & Gamble**

*Isocyanat-Chemie*

26. Januar 2010

**Dr. Hans-Jürgen Eberle, Wacker Chemie AG**

*Industrielle Prozesse mit biogenen Building Blocks*

27. April 2010

**Prof. Michael Bartke, Fraunhofer-Pilotanlagenzentrum für Polymersynthese und –verarbeitung (PAZ), Schkopau**

*Polyreaktionen im Pilotmaßstab – F&E am Fraunhofer Pilotanlagenzentrum*

18. Mai 2010

**Dipl.-Ing. Arne Bienholz, Technische Chemie II, TU Darmstadt**

*Glycerinveredlung: Herstellung von Propandiol durch selektive Hydrogenolyse von Glycerin*

22. Juni 2010

**Dr. Horst W. Zanthoff, Evonik Industries**

*Prozessentwicklung zur MTBE-Spaltung und Hochdurchsatzmethoden im industriellen Umfeld*

---

06. Juli 2010

**Dipl.-Ing. Cosmin Contiu, Technische Chemie I, TU Darmstadt**

*Über die kupferkatalysierte Partialoxidation von Alkoholen*

19. Juli 2010

**Prof. Dr. Curt Frank, Stanford University, Dept. Chemical Engineering, California, USA**

*Structural and Dynamic Properties of Polymerized Colloidal Crystalline Arrays*

02. November 2010

**Dr. Johanna Bünsow, University of Cambridge, UK**

*Mechanoresponsive Polyelectrolyte Brushes – Towards Novel Fluorescent Force Sensors*

30. November 2010

**Prof. Dr. Greg Russell, University of Canterbury, Neuseeland**

*The Last 25 Years of Progress in Radical Polymerization Kinetics*

14. Dezember 2010

**Dr. Marita Neuber, Allessa Chemie GmbH, Frankfurt a. M.**

*Funktionale Polymere für die Erdölförderung*

## 7.5. Deutsches Kunststoffinstitut

14. Januar 2010

**Dr. Christian Bonten, FKUR Kunststoff GmbH, Willich**

*Biokunststoffe – nicht nur für die Verpackung*

19. Januar 2010

**Dipl.-Ing. Jan Barth, DKI Technologie, TU Darmstadt**

*Mechanische Online-Folienprüfung im Vergleich*

21. Januar 2010

**Dr. Bernd Reck, BASF SE, Ludwigshafen**

*Wasserbasierte, thermisch vernetzbare Acrylatharze als Bindemittel für Naturfaser-Composites und Nonwovens*

21. Januar 2010

**Dipl.-Phys. Maike Bargmann, Angew. Phys. TU Darmstadt**

*Ultraschallmikroskopie an Polymerbeschichtungen*

28. Januar 2010

**Dr. Bernd Steinhoff, DKI Physik, TU Darmstadt**

*Lichtstreuung an teilkristallinen Polymeren: Grundlagen und Anwendung*

04. Februar 2010

**M. Tech. Suman Agarwal, Seminar Polymerphysik, DKI Chemie, TU Darmstadt**

*Einfluss von Bindersystem und Nanofüllern auf Härtung und Eigenschaften von UV-Lacken*

---

04. Februar 2010

**Dr. Harald Häger, Evonik Degussa GmbH, Marl**  
*Polyamide aus nachwachsenden Rohstoffen*

11. Februar 2010

**Dr. Ralf Düssel, Evonik Röhm GmbH, Darmstadt**  
*Innovationen mit PMMA*

18. Februar 2010

**B. Sc. Konrad Hilarius, DKI Physik, TU Darmstadt**  
*Untersuchungen von leitfähigen druckbaren Polymeren*

06. Mai 2010

**Dr. Ingo Alig und Dr. Dirk Lellinger, DKI Physik, TU Darmstadt**  
*Härtung und Kriechverhalten von Kunststoffmörteln im Baubereich*

18. Mai 2010

**Dipl.-Ing. Sebastian Mönlich, DKI Technologie, TU Darmstadt**  
*Anwendung und Unterschiede von Materialmodellen für die Crashsimulation in LS-Dyna*

20. Mai 2010

**Dipl.-Phys. Alexander Ohneiser, DKI Technologie, TU Darmstadt**  
*Hierarchische Strukturbildung in teilkristallinen Polymeren*

25. Mai 2010

**Cand.-Ing. Miklos Galamb, DKI Technologie TU Darmstadt**  
*FE-Berechnung und Optimierung eines Tiefeinsteiger-Fahrradrahmens*

27. Mai 2010

**Dipl.-Chem. Matthias Grönewald, DKI Physik, TU Darmstadt**  
*Elektrospinnen als faserbildende Methode zur Herstellung ultradünner Nanostrukturen*

01. Juni 2010

**Cand.-Ing. Tobias Zeeden, DKI Technologie, TU Darmstadt**  
*Untersuchung des Abbauverhaltens von Polypropylen durch Peroxide*

15. Juni 2010

**Cand.-Ing. Christian Franz, DKI Technologie, TU Darmstadt**  
*Konstruktion und Auslegung eines CFK-Fahrradrahmens*

17. Juni 2010

**Dr. Thorsten Finnberg, DKI Physik, TU Darmstadt**  
*Betriebsfestigkeit von elektroaktiven Polymeren*

24. Juni 2010

**Dipl.-Phys. Björn Bujanowski, DKI Physik, TU Darmstadt**  
*Mikrowellenspektroskopie an leitfähigen Polymerkompositionen*



---

29. Juni 2010

**Cand.-Ing. Marius Jarosch, DKI Technologie, TU Darmstadt**

*Prüfung und Modellierung des Grenzverhaltens von unverstärkten Thermoplasten*

13. Juli 2010

**Cand.-Ing. Simone Heiß, DKI Technologie, TU Darmstadt**

*Untersuchung des Aufschmelzverhaltens bei der Aufbereitung mit Hochleistungs-Doppelschneckenextrudern*

15. Juli 2010

**B. Sc. Konrad Hilarius, DKI Physik, TU Darmstadt**

*Piezoresistivität von intrinsisch leitfähigen Polymeren*

02. November 2010

**Marc Roß, DKI Technologie, TU Darmstadt**

*Untersuchung des Einflusses der Gradientendosierung auf die Compoundrezepturen unter Berücksichtigung der Verweilzeitverteilung im Doppelschneckenextruder*

09. November 2010

**Philipp Schmidt, DKI Technologie, TU Darmstadt**

*Validierung von Spritzgießsimulationen durch  $\mu$ -Computer-Tomograph-Messungen*

11. November 2010

**Dipl.-Phys. Alexander Ohneiser, DKI Physik, TU Darmstadt**

*Ultraschallspektroskopie während der Strukturbildung in teilkristallinen Polymeren*

18. November 2010

**Frau M. Tech. Suman Agarwal, DKI Chemie, TU Darmstadt**

*Härtung und Eigenschaften von UV-Lacken mit Nanofüllstoffen*

18. November 2010

**Dr.-Ing. Michael Bierdel, Bayer Technology Services, Leverkusen**

*Möglichkeiten, Grenzen und Perspektiven bei der Modellierung von Compoundierextrudern*

23. November 2010

**Robert Kurbarsic, DKI Technologie, TU Darmstadt**

*Optimierung des Insassenschutzes bei Kopfaufprall*

25. November 2010

**Prof. Dr. Vincenzo Busico, University Federico II, Neapel, Italien**

*Medium term perspectives of polyolefin R&D: the DPI vision and some more personal educated guesses*

02. Dezember 2010

**Prof. Dr. Christopher Barner-Kowollik, Institut für Technische Chemie und Polymerchemie, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe**

*Advanced Polymeric Materials via Modular Synthetic Approaches*

---

07. Dezember 2010

**Joachim Hauss, DKI Technologie, TU Darmstadt**

*Aufbau und Inbetriebnahme einer Messapparatur zur Bestimmung der Deformation einer Zugprobe in Dickenrichtung*

09. Dezember 2010

**Dipl.-Chem. Matthias Grönwald, DKI Physik TU Darmstadt**

*Ionen: Eine neue Materialklasse für elektroaktive Polymere*

## 7.6. Ausgewählte Gastredner außerhalb der Kolloquien

**AG Prof. Berger** (gesamt 5)

**Prof. Dr. W.H. Eugen Schwarz, Universität Siegen**

*The Scientific Basis of the Periodic System Cannot be Found in the Textbooks*, April 2010

**Prof. Dr. Yitzhak Apeloig, Technion, Israel**

*Recent Studies of Low-Coordination Silicon Compounds. Multiple Bonds, Metallosilanes (Silyl Anions) and Silyl Radicals*, September 2010

**Prof. Dr. Laszlo von Szentpály, Universität Stuttgart**

*From Electronegativity and Hardness to Dianion Stability and a Universal Potential Energy Curve: the Roles of Pair Interaction Correction*, November 2010

**AG Prof. Biesalski** (gesamt 10)

**Prof. Dr. S. Kleemann, Hochschule München**

*Papierchemie – woher – wohin?*, April 2010

**Dr. F. Miletzky, PTS München**

*Möglichkeiten zum sparsamen Ressourceneinsatz und zur Eigenschaftsteuerung von Papier mittels chemischer Verfahren*

**H. Grussenmayer, StoraEnso, Finnland**

*Future of Papermaking – What can Chemistry do for it*

**AG Prof. Fessner** (gesamt 2)

**Prof. Pere Clapés, Catalonia Institute for Advanced Chemistry, Barcelona, Spanien**

*Enzyme Catalyzed Asymmetric Aldol Additions: Iminosugars from DHAP to unphosphorylated donor analogues*, Januar 2010

**Prof. Sergio Riva, Istituto di Chimica del Riconoscimento Molecolare, Mailand, Italien**

*Laccase-Catalyzed Oxidation of Natural Compounds*, Juni 2010

---

**AG Prof. i.R. Haase** (gesamt 3)

**Prof. Dr. A. Neves, Department of Inorganic Chemistry, University of Santa Catarina, Florianopolis, Brasilien**

*Linkage between dimeric exchange coupled units and biocatalytic activity*, November 2010

**Prof. Dr. E. A. Soto-Bustamante, Faculty for Chemistry and Pharmacy, University of Chile, Santiago, Chile**

*Elektropolymerisation-a new synthetic route*, Juli 2010

**AG Prof. Müller-Plathe** (gesamt 14)

**Prof. Nikos Benteinis, Southwestern University**

*Developing Force Fields from the Microscopic Structure of Solutions: The Kirkwood-Buff Approach*, Juli 2010

**Prof. Samuel Trickey, University of Florida**

*Progress on Orbital free Density Functionals*, September 2010

**Prof. Bernd Stühn, FB Physik der TU Darmstadt**

*Polymer in nanopores and at nanotubes*, Oktober 2010

**AG Prof. Reggelin** (gesamt 11)

**Dr. Armano Navarro, Universidade de Vigo, Spanien**

*Automatic extraction of RDCs. Conformational analysis of the lorcaserin anti-obesity drug*, Mai 2010

**Dr. Roberto Gil, Research Scientist and Director, NMR Facility Department of Chemistry Carnegie Mellon University Pittsburgh**

*RDCs Analysis of Small Molecules Made Easy: Fast and Tuneable Alignment by Reversible Compression/ Relaxation of Reusable PMMA Gels*, Mai 2010

**Prof. Dr. Philippe Lesot, Directeur de Recherches Université Paris-Sud**

*Opportunities and Challenges in NAD-NMR Spectroscopy using Polypeptide Oriented Systems as Enantiodiscriminating Matrices*, Mai 2010

**AG PD Dr. Thiele** (gesamt 1)

**Dr. W. Bermel, Bruker Biospin, Applikationschemiker**

*Phasenzyklen*, November 2010

---

**AG Prof. van der Vegt** (gesamt 3)

**Prof. Ping Sheng, Department of Physics, HKUST, Hong Kong**

*Hydrodynamic boundary conditions: An emergent behavior of fluid-solid interactions,*  
Juni 2010

**Prof. Dr. David Brown, University of Savoie**

*Oxygen Sorption in Glassy Polymers Studied at the Molecular Level,* April 2010

**Victor Ruehle and Christoph Junghans, MPI for Polymer Research Mainz**

*VOTCA - Versatile Object-oriented Toolkit for Coarse-graining Applications,* Mai 2010

**AG Prof. Vogel** (gesamt 9)

**Dr. Eberle, Wacker Chemie AG**

*Industrielle Prozesse mit biogenen Building-Blocks,* Januar 2010

**Dr. Horst-Werner Zanthoff, Evonik Degussa**

*Prozess-Entwicklung zur MTBE-Spaltung und Hochdurchsatzmethoden im industriellen Umfeld,*  
Juni 2010

**Dr. Marita Neuber, Allessa-Chemie**

*Funktionale Polymere für die Erdölförderung,* Dezember 2010

---

## 8. Auswärtige wissenschaftliche Vorträge der Arbeitsgruppenmitglieder

---

Im Jahr 2010 wurden insgesamt 124 auswärtige wissenschaftliche Vorträge der Arbeitsgruppenmitglieder gehalten. Aufgeführt ist lediglich ein Vortrag bei einer internationalen Konferenz:

**Prof. Dr. B. Albert** (gesamt 3)

MRL Seminar, *Metal Borides - whether hard materials, thermoelectrics, or catalysts - they always exhibit fascinating crystal structures*, University of California, Santa Barbara, Februar 2010

**Prof. Dr. R. Berger** (gesamt 7)

Conference on Relativistic Effects in Heavy Elements (REHE), *Parity violation in lasercooled heavy diatomics*, Beijing China

**Prof. Dr. M. Biesalski** (gesamt 9)

Plenarvortrag: 3<sup>rd</sup> Sino-German Symposium, GDCh, *Bioinspired Concepts in Supramolecular Science & Technology*, Seon

**Prof. Dr. G. Buntkowsky** (gesamt 4)

Ampere XV NMR School, *Solid State NMR Studies of Nanocatalysts*, Wierzba, Polen

**Prof. Dr. M. Busch** (gesamt 3)

Uhde Global LDPE Workshop, *LDPE Process Development with Pilot Plants - Upscale and Safety Considerations*, Hagen, Juni 2010

**Prof. Dr. P. Claus** (gesamt 8)

Fritz-Haber-Institut, Lecture Series, *Heterogeneously catalyzed production of chemicals from biomass-derived educts*, *Modern Methods in Heterogeneous Catalysis Research*, Berlin, Februar 2010

**Prof. Dr. N.A. Dencher** (gesamt 9)

Telluride Science Research Conference "Proton Transfer in Biology", *Picosecond-dynamics and supramolecular architecture determine the function of proton-transporting membrane proteins*, Telluride, USA, August 2010

**Prof. Dr. K.D. Dinse** (gesamt 2)

SFB 546 Workshop EPR studies of supported vanadia catalysts, *Struktur, Dynamik und Reaktivität von Übergangsmetalloxid-Aggregaten*, Berlin, Februar 2010

**Prof. Dr. W.-D. Fessner** (gesamt 3)

CNRS-Seminar Université Blaise Pascal, *Biomedicals Development by Chemo-Enzymatic Routes: From Simple Monosaccharides to Complex Oligosaccharides to Multivalent Glycoclusters*, Aubière, Mai 2010

**Prof. i.R. Dr. W. Haase** (gesamt 5)

3<sup>rd</sup> International Workshop on Liquid Crystals for Photonics LCP 2010, *Behavior of Nano- and Microparticles doped in Liquid Crystals*, Elche, Spanien, September 2010

**Prof. Dr. C. Hess** (gesamt 2)

IMM, Young Scientists Workshop, *Raman scattering in materials science: Examples from current research*, Mainz, November 2010

---

**Prof. Dr. H. Kolmar** (gesamt 3)

Universität Ulm, *Maßgeschneiderte Wirkstoffe und Enzyme durch mikrobielle Oberflächenpräsentation kombinatorischer Proteinbibliotheken*, Ulm, Februar 2010

**Prof. Dr. F. Müller-Plathe** (gesamt 13)

Gordon Research Conference on Computational Chemistry Les Diablerets, *Multiscale Simulation of Soft Matter: Status & Perspectives*, Schweiz, August 2010

**Prof. Dr. S. Neumann**

Symposium on Signaling Cancer, Institut für Molekulare Pathologie, *Research and Development in the Drug Industry*, Wien, Dezember 2010

**Prof. Dr. H. Plenio** (gesamt 5)

NHC-Symposium, Canadian Chemical Society Meeting, *NHC Ligands for Olefin Metathesis Reactions*, Toronto, Kanada, Mai 2010

**Prof. Dr. M. Reggelin**

BIOTECHNICA BMBF Projektforum, *Therapie chronischer Wunden und bakterieller Infektionen*, Hannover, Oktober 2010

**Prof. Dr. M. Rehahn** (gesamt 3)

Euromold Konferenz Materials in Progress, *Nanotechnologie in Kunststoffen und Polymeroberflächen*, Frankfurt, Dezember 2010

**Prof. Dr. B. Schmidt** (gesamt 5)

KNDD Symposium, *Lipids and Alzheimer Demenz*, Berlin, März 2010

**Prof. Dr. J.J. Schneider** (gesamt 15)

34<sup>th</sup> International Conference & Exposition on Advanced Ceramics and Composites, *Exploring Regular Carbon Nanostructures for Engineering Applications*, Florida, USA, Januar 2010

**PD Dr. C.M. Thiele** (gesamt 12)

Experimental NMR Conference, *Recent advances in the Use of RDCs for Organic Structure Determination*, Daytona Beach, USA, April 2010

**Prof. Dr. N.A. van der Vegt** (gesamt 10)

49<sup>th</sup> Tutzing Symposium, Adsorption – delving into the molecular scale. *Adsorption – what can molecular simulation contribute?*, Tutzing, Juni 2010

**Prof. Dr. H. Vogel** (gesamt 4)

12<sup>th</sup> European Meeting on Supercritical Fluids, *Dehydration of 2,3-butanediol*, Graz, Mai 2010

---

## 9. Veröffentlichungen nach Arbeitsgruppen

---

### 9.1. Anorganische Chemie

#### Prof. Dr. B. Albert

##### Begutachtete:

Frotscher, M., Hölzel, M. and Albert, B. (2010). *Crystal Structures of the Metal Diborides ReB<sub>2</sub>, RuB<sub>2</sub>, and OsB<sub>2</sub> from Neutron Powder Diffraction*. Z Anorg Allg Chemie, **636**, 1783-1786.

Hord, R., Luetkens, H., Pascua, G., Buckow, A., Hofmann, K., Krockenberger, Y., Kurian J., Maeter, H., Klaus, H.-H., Pomjakushin, V., Suter, A., Albert, B. and Alff, L. (2010). *Enhanced two-dimensional behavior of metastable T'-La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub>, the parent compound of electron-doped cuprate superconductors*. Phys Rev B, **82**, 180508-1–180508-4.

Bratz, K., Wörz, N., Brandner, A., Hofmann, K., Claus, P. and Albert, B. (2010). *Co<sub>2</sub>B als interessanter Katalysator in der Citraldehydhydrierung*. Z Anorg Allg Chem, **636** (11), 2098.

##### Sonstige:

Albert, B. (2010). *Wissenschaftlicher Nachwuchs*. Nachrichten aus der Chemie, 09/10.

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

##### Begutachtete:

Gaube, J. and Klein, H.F. (2010). *Further support for the two-mechanisms hypothesis of Fischer-Tropsch synthesis*. Appl Catal A: General, **374** (1-2), 120-125.

#### Prof. Dr. H. Plenio

##### Begutachtete:

Vorfalt T., Wannowius, K.J., Thiel, V. and Plenio, H. (2010). *How Important Is the Release-Return Mechanism in Olefin Metathesis?* Chem A Eur J, **16**, 12312-12315.

Peeck, L.H., Leuthausser, S. and Plenio, H. (2010). *Switched Stereocontrol in Grubbs-Hoveyda Complex Catalyzed ROMP Utilizing Proton-Switched NHC Ligands*. Organometallics, **29**, 4339-4345.

Wolf, S. and Plenio, H. (2010). *Facile synthesis of [(NHC)(NHC<sub>ewg</sub>)RuCl<sub>2</sub>(CHPh)] complexes*, J Organomet Chem, **695**, 2418-2422.

Vorfalt, T., Wannowius, K.J. and Plenio, H. (2010). *Probing the Mechanism of Olefin Metathesis in Grubbs-Hoveyda and Grela Type Complexes*. Angew Chem Int Ed, **49**, 5533-5536.

Roy, S. and Plenio, H. (2010). *Sulfonated N-Heterocyclic Carbenes for Pd-Catalyzed Sonogashira and Suzuki-Miyaura Coupling in Aqueous Solvents*. Adv Synth Catal, **352**, 1014-1022.

---

Peeck, L.H. and Plenio, H. (2010). *Synthesis and RCM Activity of [(NHC)(NHC<sub>ewg</sub>)RuCl<sub>2</sub>(3-phenylindenylid-1-ene)] Complexes*. *Organometallics*, **29**, 2761-2766.

Pschierer, J. and Plenio, H. (2010). *Suzuki-Miyaura Coupling of Aryl Tosylates and Mesylates in Water*. *Eur J Org Chem*, 2934-2937.

Pschierer, J., Peschek, N. and Plenio, H. (2010). *Cross coupling in water: Suzuki-Miyaura vinylation and difluorovinylation of arylboronic acids*. *Green Chem*, **12**, 636-642.

Sashuk, V., Peeck, L.H. and Plenio, H. (2010). *[(NHC)(NHC<sub>ewg</sub>)RuCl<sub>2</sub>(CHPh)] Complexes with Modified NHC<sub>ewg</sub> Ligands for Efficient Ring-Closing Metathesis Leading to Tetrasubstituted Olefins*. *Chem Eur J*, **41**, 3983-3993.

Fleckenstein, C.A. and Plenio, H. (2010). *Sterically demanding trialkylphosphines for palladium-catalyzed cross coupling reactions-alternatives to PtBu<sub>3</sub>*. *Chem Soc Rev*, **39**, 694-711.

#### **Prof. Dr. J.J. Schneider**

##### Begutachtete:

Kanderi, J., Hoffmann, R.C., Engstler, J., Schneider, J.J., Arras, J., Claus, P. and Cherkashinin, G. (2010). *Binary Au/MWCNT and Ternary Au/ZnO/MWCNT Nanocomposites: Synthesis, Characterization and Catalytic Performance*. *Chem Eur J*, **16**, 2011-2020.

Popp, A., Siozios, V. and Schneider, J.J. (2010). *Highly Aligned Carbon Nanotubes Sandwiched Between Facially Arranged Ceramic Alumina Layers*. *J Am Ceram Soc*, **93**, 638-641.

Pashchanka, M., Hoffmann, R.C. and Schneider, J.J. (2010). *Controlled synthesis and characterisation of MgO nanoparticles, thin films and polycrystalline nanorods derived from a Mg(II) single source precursor*. *J Mater Chem*, **20**, 957-963.

Joshi, R., Yilmazoglu, O., Schneider, J.J. and Pavlidis, D. (2010). *Patterned growth of ultra long carbon nanotubes. Properties and systematic investigation into their growth process*. *J Mater Chem*, **20**, 1717-1721.

Yilmazoglu, O., Popp, A., Pavlidis, D. and Schneider, J.J. (2010). *Flexible field emitter arrays with adjustable carbon nanotube distances and bundle generation*. *J Vac Sci Technol B*, **28**, 268-272.

Schneider, J.J., Hoffmann, R.W., Engstler, J., Erdem, E., Jakes, P., Eichel, R., Bill, J. and Pitta-Bauermann, L. (2010). *Molecular routes to monomodal zinc oxide nanoparticles. Synthesis, characterization and defect chemistry*. *J Chem Mater*, **22**, 2203-2212.

Khanderi, J., Hoffmann, R.C. and Schneider, J.J. (2010). *A 3D monolithic CNT block structure as reductant, support and scavenger for nanoscopic gold, platinum and zinc oxide*. *Nanoscale*, **2**, 613-622.



---

Mahanandia, P., Schneider, J.J., Khanefit, M., Stühn, B., Peixoto, T.P. and Drossel, B. (2010). *Polymer confinement effects in aligned carbon nanotubes arrays*. Phys Chem Chem Phys, **12**, 4407-4417.

Heyl, D., Rikowski, E., Hoffmann, R.C., Schneider, J.J. and Fessner, W.-D. (2010). *A “Clickable” Hybrid Nanocluster of Cubic Symmetry*. Chem Eur J, **16**, 5544-5548.

Fabritz, S., Heyl, D., Bagutski, V., Empting, M., Rikowski, E., Frauendorf, H., Balog, I., Fessner, W.-D., Schneider, J.J., Avrutina, O. and Kolmar, H. (2010). *Towards click bioconjugations on cube-octameric silsesquioxane scaffolds*. Org Biomol Chem, **8**, 2212 – 2218.

Tempel, H., Joshi, R. and Schneider, J.J. (2010). *Ink jet printing of ferritin as method for selective catalyst patterning and growth of multiwalled carbon nanotubes*. Mat Chem Phys, **121**, 178–183.

Joshi, R., Engstler, J., Houben, L., Bar Sadan, M., Weidenkaff, A., Mandaliev, P., Issanin, A. and Schneider, J.J. (2010). *Catalyst Composition, Morphology and Reaction Pathway in the Growth of “Super-Long” Carbon Nanotubes*. Chem Cat Chem, **2**, 1069-1073.

Khanderi, J.P. and Schneider, J.J. (2010). *A single source Co/Li/O organometallic precursor for nanocrystalline LiCoO<sub>2</sub>. Synthesis, formation pathway and its electrochemical performance*. Eur J Inorg Chem, 4591–4594.

Hoffmann, R.C., Dilfer, S., Issanin, A. and Schneider, J.J. (2010). *Solution processed ZnO. Challenges in processing and performance on flexible substrates*. Phys Status Solidi A, **207**, 1590–1595.

Pashchanka, M., Hoffmann, R.C., Gurlo, A. and Schneider, J.J. (2010). *Molecular based, chimie douce approach to 0D and 1D indium oxide nanostructures. Evaluation of their different sensing properties towards CO and H<sub>2</sub>*. J Mater Chem, **20**, 8311– 8319.

König, M., Hohn, S., Hoffmann, R.C., Suffner, J., Lauterbach, S., Weiler, L., Guillon, O. and Rödel, J. (2010). *Sintering of hierarchically structured ZnO*. J Mater Res, **25**, 2125-2134.

#### Sonstige:

Schneider, J.J. (2010). *Patentanmeldung und Hochschule*. Patentieren von Nanotechnologien, Schriftenreihe der Aktionslinie Hessen-Nanotech des HMWVL, **19**, 54.

Schneider, J.J. (2010). *Austausch Academia und Industrie*. Nachrichten aus der Chemie, **58**, 838-840.

---

## 9.2. Physikalische Chemie

Prof. i.R. Dr. J. Brickmann

Begutachtete:

Brickmann, J., Parpacone, R., Kokolakis, S., Zahn, D., Duchstein, P., Carrillo-Cabrera, W., Simon, P. and Kniep, R. (2010). *Fluorapatite-Gelatine Nanocomposite Superstructures: New Insights into a Biomimetic System of High Complexity*. Chem Phys Chem, **11** (9), 1851-1853.

Prof. Dr. G. Buntkowsky

Begutachtete:

Gutmann, T., Walaszek, B., Xu, Y., Wächtler, M., deRosal, I., Grünberg, A., Poteau, R., Axet, R., Lavigne, G., Chaudret, B., Limbach, H.-H. and Buntkowsky, G. (2010). *Hydrido-ruthenium cluster complexes as models for reactive surface hydrogen species of ruthenium nanoparticles – Solid-state  $^2\text{H}$  NMR and quantum chemical calculations*. J Am Chem Soc, **132** (33), 11759-11767.

Waechtler, M., Sellin, M., Stark, A., Akcakayiran, D., Findenegg, G., Grünberg, A., Breitzke, H. and Buntkowsky, G. (2010).  *$^2\text{H}$  and  $^{19}\text{F}$  Solid-State NMR Studies of the Ionic Liquid  $\text{C}_2\text{PyBTA-d10}$  Confined in Mesoporous Silica Materials*. Phys Chem Chem.Phys, **12** (37), 11371-11379.

Bommerich, U., Trantzschel, T., Mulla-Osman, S., Buntkowsky, G., Bargon, J. and Bernarding, J. (2010). *Hyperpolarized  $^{19}\text{F}$ -MRI: parahydrogen induced polarization and field variation enabling  $^{19}\text{F}$ -MRI at low spin density*. Phys Chem Chem Phys, **12** (35), 10309-10312.

Ip, B., Andreeva, D.V., Buntkowsky, G., Akcakayiran, D., Findenegg, G.H. and Shenderovich, I.G. (2010). *NMR study of proton transfer to strong bases on inner surfaces of MCM-41*. Microporous and Mesoporous Materials, **134**, 22-28.

Tietze, D., Tischler, M., Voigt, S., Imhof, D., Ohlenschläger, O., Görlach, M. and Buntkowsky, G. (2010). *Development of a functional cis prolyl bond biomimetic and mechanistic implications for nickel superoxide dismutase*. Chem Eur J, **16**, 7572-7578.

Grünberg, A., Xu, Y., Breitzke, H. and Buntkowsky, G. (2010). *Solid State NMR characterization of the Wilkinson's catalyst immobilized in mesoporous SBA-3 silica*. Chem Eur J, **16**, 6993-6998.

Sonstige:

Buntkowsky, G. and Breitzke, H. (2010). *Strukturen und ihr Wandel: Was uns Kernspins erzählen*. Nachrichten aus der Chemie, **58** (2), 122-126.

---

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

Begutachtete:

Dinse, K.-P., van Tol, J., Ozarowski, A. and Corzilius B. (2010). *Multi-Frequency EPR and DC Conductivity of Itinerant Spins in Single-Wall Carbon Nanotubes*, *Appl Magn Reson*, **37**, 595-603.

Nikawa, H., Araki, Y., Slanina, Z., Tsuchiya, T., Akasaka, T., Wada, T., Ito, O., Dinse, K.-P., Ata, M., Kato, T. and Nagase, S. (2010). *The effect of atomic nitrogen on the C60 cage*. *Chem Commun*, **46**, 631-633.

Stork, H., Dinse, K.-P., Ditter, M., Fujara, F., Masierak, W., Neumann, R., Schuster, B., Schwartz, K. and Trautmann, C. (2010). *Spatially resolved nuclear spin relaxation, electron spin relaxation and light absorption in swift heavy ion irradiated LiF crystals*. *J Phys Condens Matter*, **22**, 185402-185410.

Myrach, P., Nilius, N., Levchenko, S., Gonchar, A., Risse, T., Dinse, K.-P., Boatner, L.A., Frandsen, W., Horn, R., Freund, H.J., Schlögl, R. and Scheffler, M. (2010). *Temperature-dependent Morphology; Magnetic and Optical Properties of Li-doped MgO*. *ChemCatChem*, **2** (7), 854-862.

**Prof. i.R. Dr. W. Haase**

Begutachtete:

Ryzhkova, A.V., Podgornov, F.V. and Haase, W. (2010). *Nonlinear electrophoretic motion of dielectric microparticles in nematic liquid crystals*. *Appl Phys Lett*, **96** (15), 151901.

Gonzalez-Henriquez, C.M., Soto-Bustamante, E.A., Gordillo, D.A.W. and Haase, W. (2010). *Synthesis and mesomorphic properties of different liquid crystal methacrylic azo monomers with de Vries-like behavior*. *Liq Cryst*, **37** (2), 217-225.

Dzhabarov, V.I., Knyazev, A.A., Strelkov, M.V., Molostova, E.Y., Schustov, V.A., Haase, W. and Galyametdinov, Y.G. (2010). *Tris ( $\beta$ -diketonates) lanthanum nematic adducts*. *Liq Cryst*, **37** (3), 285-291.

Kumar, A., Prakash, J., Biradar, A.M. and Haase, W. (2010). *Abiding Electro-Optic Memory Effect Based on Deformed Helix Ferroelectric Liquid Crystal*. *Appl Phys Expr*, **3**, 091701.

Ostrovsky, S., Tomkowicz, Z. and Haase, W. (2010). *Exchange-Coupled Cobalt(II) dimer with unusual magnetic circular dichroism saturation behavior*. *Inorg Chem*, **49** (15), 6942-6947.

Lapanik, V., Bezborodov, V., Timofeev, S. and Haase, W. (2010). *Shock-free ferroelectric liquid crystal displays with high optical contrast*. *Appl Phys Lett*, **97** (25), 251913.

Podgornov, F.V., Ryzhkova, A.V. and Haase, W. (2010). *Influence of gold nanorods size on electro-optical and dielectric properties of ferroelectric liquid crystals*. *Appl Phys Lett*, **97** (21), 212903.

---

Haldar, S., Barman, S., Mandal, P.K., Haase, W. and Dabrowski, R (2010). *Influence of Molecular Core Structure and Chain Length on the Physical Properties of Nematogenic Fluorobenzene Derivatives*. Mol Cryst Liq Cryst, **528** (1), 81-95.

Knyazev, A.A., Dzhabarov, V.I., Lapaev, D.V., Lobkov, V.S., Haase, W. and Galyametdinov, Y.G. (2010). *New Nematogenic ( $\beta$ -Diketones) for Synthesis of Lanthanidomesogens*. Russ J General Chem, **80** (4), 756-760.

#### **Prof. Dr. C. Hess**

##### Begutachtete:

Walter, A., Herbert, R., Hess, C. and Ressler, T. (2010). *Structural characterization of vanadium oxide catalysts supported on nanostructured silica SBA-15 using X-ray absorption spectroscopy*. Chem Central J, **4**.

Suffner, J., Lattemann, M., Hahn, H., Giebeler, L., Hess, C., Cano, I.G., Dosta, S., Guilemany, J. M., Musa, C., Locci, A.M., Licheri, R., Orr, R. and Cao, G. (2010). *Microstructure Evolution During Spark Plasma Sintering of Metastable ( $ZrO_2$ -3 mol%  $Y_2O_3$ ) -20 wt%  $Al_2O_3$  Composite Powders*. J Am Ceramic Soc, **93** (9), 2864-2870.

Thielemann, J.P., Kröhnert, J. and Hess, C. (2010). *Nitric Oxide Adsorption and Oxidation on SBA-15 Supported Molybdenum Oxide: A Transmission IR Study*. J Phys Chem C, **114** (40), 17092-17098.

#### **Prof. Dr. F. Müller-Plathe**

##### Begutachtete:

Carbone, P., Karimi-Varzaneh, H.A. and Müller-Plathe, F. (2010). *Fine-graining without coarse-graining: an easy and fast way to equilibrate dense polymer melts*. Faraday Discuss, **144**, 25-42.

Eslami, H. and Müller-Plathe, F. (2010). *Viscosity of Nanoconfined Polyamide-6,6 Oligomers: Atomistic Reverse Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulation*. J Phys Chem B, **114** (1), 387-395.

Cordeiro, R., Zschunke, F. and Müller-Plathe, F. (2010). *Mesoscale Molecular Dynamics Simulations of the Force between Surfaces with Grafted Poly(ethylene oxide) Chains Derived from Atomistic Simulations*. Macromol, **43** (3), 1583-1591.

Alaghemandi, M., Leroy, F., Algaer, E., Böhm, M.C. and Müller-Plathe, F. (2010). *Thermal rectification in mass-graded nanotubes: a model approach in the framework of reverse non-equilibrium molecular dynamics simulations*. Nanotechnology, **21**, 075704.

Weiss, V.C., Heggen, B. and Müller-Plathe, F. (2010). *Critical parameters and surface tension of the room temperature ionic liquid [bmim][PF<sub>6</sub>]: a corresponding-states analysis of experimental and new simulation data*. J Phys Chem C, **114** (8), 3599-3608.

- 
- Alaghemandi, M., Leroy, F., Müller-Plathe, F. and Böhm, M.C. (2010). *Thermal rectification in nanosized model systems: A molecular dynamics approach*. Phys Rev B, **81**, 125410(1-12).
- Karimi-Varzaneh, H.A., Müller-Plathe, F., Balasubramanian, S. and Carbone, P. (2010). *Studying long-time dynamics of imidazolium-based ionic liquids with a systematically coarse-grained mode*. Phys Chem Chem Phys, **12**, 4714–4724.
- Heggen, B., Zhao, W., Leroy, F., Dammers, A.J. and Müller-Plathe, F. (2010). *Interfacial Properties of an Ionic Liquid by Molecular Dynamics*. J Phys Chem B, **114** (20), 6954–6961.
- Sarang, S.S., Zhao, W., Müller-Plathe, F. and Balasubramanian, S. (2010). *Correlation between dynamic heterogeneity and local structure in a room-temperature ionic liquid. A molecular dynamics study of [bmim][PF<sub>6</sub>]*. ChemPhysChem, **11** (9), 2001–2010.
- Leroy, F. and Müller-Plathe, F. (2010). *Solid-liquid surface free energy of Lennard-Jones liquid on smooth and rough surfaces computed by molecular dynamics using the phantom-wall method*. J Chem Phys, **133** (4).
- Farah, K., Karimi Varzaneh, H.A., Müller-Plathe, F. and Böhm, M.C. (2010). *Reactive Molecular Dynamics with Material-Specific Coarse-Grained Potentials: Growth of Polystyrene Chains from Styrene Monomers*, J Phys Chem B, **114**, 13656–13666.
- Hülsmann, M., Müller, T.J., Köddermann, T. and Reith, D. (2010). *Automated Force Field Optimisation of Small Molecules using a Gradient-Based Workflow Package*. Mol Sim, **36**, 1182-1196.
- Riccardi, E., Wang, J.C. and Liapis, A.L. (2010). *Molecular Dynamics Modeling and Simulation Study of the Transport and Adsorption of a Charged Biomolecule onto a Charged Ligand Immobilized in a Polymeric Adsorbent Medium*. J Chem Phys, **133**, 084904.
- Liapis, A.L., Riccardi, E., Wang, J.C. and Separ, J. (2010). *Effects on the dynamic utilization of the adsorptive capacity of chromatographic columns induced by non-uniform ligand density distributions*. J Sep Sci, **33**, 2749-2756.

Sonstige:

- Leroy, F. (2010). *Review of the second edition of Principles of Physical Chemistry by H. Kuhn, H.-D. Försterling and D. H. Waldeck*. BUNSEN-MAGAZIN, **4**, 149.

---

**Prof. Dr. R. Schäfer**

Begutachtete:

Schießer, A., Hörtz, P. and Schäfer, R. (2010). *Thermodynamics and kinetics of CO and benzene adsorption on Pt(111) studied with pulsed molecular beams and microcalorimetry*, Surf Sci, **604** (23-24), 2098-2105.

Assadollahzadeh, B., Schäfer, S. and Schwerdtfeger, P. (2010). *Electronic Properties for Small Tin Clusters  $Sn_n$  ( $n \leq 20$ ) from Density Functional Theory and the Convergence toward the Solid State*. J Comput Chem, **31**, 929-937.

Heiles, S., Schäfer, S. and Schäfer, R. (2010) *Mass spectrometry and beam deflection studies of tin-lead nanoalloy clusters*. Phys Chem Chem Phys, **12**, 247–253.

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

Begutachtete:

Ensling, D., Thissen, A., Laubach, S., Schmidt, P.C. and Jaegermann, W. (2010). *Electronic structure of LiCoO(2) thin films: A combined photoemission spectroscopy and density functional theory study*. Phys Rev B, **82** (19).

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

Begutachtete:

Chen, S., Huang, X., van der Vegt, N.F.A., Wen, W. and Sheng, P. (2010). *Giant Electrorheological Effect: A Microscopic Mechanism*. Phys Rev Lett, **105**, 046001.

Neyertz, S., Brown, D., Pandiyan, S. and van der Vegt, N.F.A. (2010). *Carbon Dioxide Diffusion and Plasticization in Fluorinated Polyimides*. Macromol, **43** (18), 7813–7827.

Pandiyan, S., Brown, D., Neyertz, S. and van der Vegt, N.F.A. (2010). *Carbon Dioxide Solubility in Three Fluorinated Polyimides Studied by Molecular Dynamics Simulations*. Macromol, **43**, 2605 - 2621.

Peter, C., Villa, A. and van der Vegt, N.F.A. (2010). *Transferability of Nonbonded Interaction Potentials for Coarse-Grained Simulations: Benzene in Water*. J Chem Theory Comput, **6** (8), 2434-2444.

van der Vegt, N.F.A., Kusuma, V.A. and Freeman, B.D. (2010). *Basis of Solubility versus TC Correlations in Polymeric Gas Separation Membranes*. Macromol, **43** (3) 1473-1479.

---

### 9.3. Technische Chemie

**Prof. Dr. M. Busch**

Begutachtete:

Bauer, C., Becker, K., Herrmann, T., Lilge, D., Roth, M. and Busch, M. (2010). *From Fundamental Polymerization Kinetics to Process Application-A Realistic Vision?* Macromol Chem Phys, **211**(5),510-519.

**Prof. Dr. P. Claus**

Begutachtete:

Bienholz, A., Schwab, F. and Claus, P. (2010). *Hydrogenolysis of glycerol over a highly active CuO/ZnO catalyst prepared by an oxalate gel method: Influence of the solvent and the reaction temperature on the catalyst deactivation.* Green Chem, **12**, 290-295.

Hohmeyer, J., Kondratenko, E., Bron, M., Kröhnert, J., Jentoft, F.C., Schlögl, R. and Claus, P. (2010). *Activation of dihydrogen on supported and unsupported silver catalysts.* J Catal, **269**, 5-14.

Mennemann, C. and Claus, P. (2010). *Influence of cobalt in gold catalysed gas phase propene epoxidation: Enhancement of Au uptake and catalyst activity.* Catal Letters, **134**, 31–36.

Wörz, N., Brandner, A. and Claus, P. (2010). *Platinum-Bismuth Catalyzed Oxidation of Glycerol: Kinetics and the Origin of Selective Deactivation.* J Phys Chem C, **114**, 1164-1172.

Khanderi, J., Hoffmann, R.C., Engstler, J., Schneider, J.J., Arras, J., Claus, P. and Cherkashinin, G. (2010). *Binary Au@CNT and Ternary Au@ZnO@CNT Nanocomposites. Synthesis, characterization and catalytic performance.* Chem Europ J, **16** (7), 2300-2308.

Klimczak, M., Kern, P., Heinzelmann, T., Lucas, M. and Claus, P. (2010). *High-Throughput Study of the Effects of Inorganic Additives and Poisons on NH<sub>3</sub>-SCR Catalysts - Part I: V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-WO<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub> Catalysts.* Appl Catal B: Environmental, **95** (1-2), 39-47.

Kern, P., Klimczak, M., Heinzelmann, T., Lucas, M. and Claus, P. (2010). *High-Throughput Study of the Effects of Inorganic Additives and Poisons on NH<sub>3</sub>-SCR Catalysts - Part II: Fe-Zeolite Catalysts.* Appl Catal B: Environmental, **95** (1-2), 48-56.

Claus, P. (2010). *Design von Metall/Träger-Katalysatoren durch ionische Flüssigkeiten (SCILL): Vom Verständnis zur Anwendung in der Selektivhydrierung.* Chem Ing Techn, **82** (9), 1325.

Claus, P. (2010). *Hydrierung nach SCILL-Konzept.* Z Anorg Allg Chem, **636** (11), 2042.

Bratz, K., Wörz, N., Brandner, A., Hofmann, K., Claus, P. and Albert, B. (2010). *Co<sub>2</sub>B als interessanter Katalysator in der Citralhydrierung,* Z Anorg Allg Chem, **636** (11), 2098.

---

Wörz, N., Arras, J. and Claus, P. (2010). *Continuous selective hydrogenation of citral in a trickle-bed reactor using ionic-liquid modified catalysts*. Appl Catal A: General, doi:10.1016/j.apcata.2010.06.025.

Bienholz, A., Hofmann, H. and Claus, P. (2010). *Selective hydrogenolysis of glycerol over copper catalysts both in liquid and vapour phase: Correlation between the copper surface area and the catalyst's activity*. Appl Catal A: General, doi:10.1016/j.apcata.2010.08.047.

Bienholz, A., Blume, R., Knop-Gericke, A., Giergsdies, F., Behrens, M. and Claus, P. (2010). *Prevention of Catalyst Deactivation in the Hydrogenolysis of Glycerol by Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Modified Copper/Zinc Oxide*. Catal J Phys Chem C, doi: 10.1021/jp104925k.

Sonstige: 19

**Prof. em. Dr. J. Gaube**

Begutachtete:

Gaube, J. and Klein, H.F. (2010). *Further support for the two-mechanisms hypothesis of Fischer-Tropsch synthesis*. Appl Catal A: General, **374** (1-2), 120-125.

**Prof. Dr. H. Vogel**

Begutachtete:

Kohl, S., Drochner, A. and Vogel, H. (2010). *Quantification of oxygen surface groups on carbon materials via diffuse reflectance FT-IR spectroscopy and temperature programmed desorption*. Catal Today, **150** (1-2), 67-70.

Votsmeier, M., Scheuer, A., Drochner, A., Vogel, H. and Gieshoff, J. (2010). *Simulation of automotive NH<sub>3</sub> oxidation catalysts based on pre-computed rate data from mechanistic surface kinetics*. Catal Today, **151** (3-4), 271-277.

Contiu, C., Berg, J., Drochner, A., Vogel, H. and von Watzdorf, R. (2010). *Activity and selectivity investigations of copper catalysis by concentration programmed reaction method*. Catal Today, **157** (1-4), 231-235.

Giebeler, L., Wirth, A., Martens, J.A., Vogel, H. and Fuess, H. (2010). *Phase transitions of V-Mo-W mixed oxides during reduction/re-oxidation cycles*. Appl Catal A: General, **379** (1-2), 155-165.

Sarlea, M., Kohl, S., Blickhan, N. and Vogel, H. (2010). *Valeronitrile Hydrolysis in Supercritical Water*. ChemSusChem, **3** (1), 85-90.



---

Klingler, D. and Vogel, H. (2010). *Influence of process parameters on the hydrothermal decomposition and oxidation of glucose in sub- and supercritical water*. J Supercritical Fluids, **55** (1), 259-270.

Sonstige: 6

#### **9.4. Makromolekulare Chemie**

**Prof. Dr. M. Biesalski**

Begutachtete:

Gokhale, R., Couet, J. and Biesalski, M. (2010). *In situ cross-linking of the shell of peptide-polymer nanotubes*. Phys Stat Solidi A, **207** (4), 878-883.

Samyn, P., Rühle, J. and Biesalski, M. (2010). *Biomimetic polymerized vesicles with controlled local presentation of adhesive DOPA-groups*. Langmuir, **26** (11), 8573-8581.

Sonstige:

Biesalski, M., Gattermayer, M., Petersen, S. and Müller-Sievers, M. (2010). In Applied Interface-Science, Dietz, W., Bley, L., Greuz, R. (Eds.). Books on demand.

**Prof. Dr. H. Pasch**

Begutachtete DKI:

Houillot, L., Bui, C. Farcet, C., Moire, C., Rast, J.A., Pasch, H., Save, M. and Charleux, B. (2010). *Dispersion Polymerization of Methyl Acrylate in Nonpolar Solvent Stabilized by Block Copolymers Formed In situ via the RAFT Process*. ACS Appl Mat, **2** (2), 434-442.

Raust, J.A., Bruell, A., Sinha, P., Hiller, W. and Pasch, H. (2010). *Two-dimensional chromatography of complex polymers, 8. Separation of fatty alcohol ethoxylates simultaneously by end group and chain length*. J Sep Sc, **33** (10).

Navarrete, P., Pizzi, A., Pasch, H., Rode, K. and Delmotte, L. (2010). *MALDI-TOF and (13)C NMR characterization of maritime pine industrial tannin extract*. Ind Crops Prod, **32** (2), 105-110.

Maciejczek, A., Mass, V., Rode, K. and Pasch, H. (2010). *Analysis of poly(ethylene oxide)-b-poly(propylene oxide) block copolymers by MALDI-TOF mass spectrometry using collision induced dissociation*. Polymer, **51** (26), 6140-6150.

Otte, T. Brull, R., Macko, R., Pasch, H. and Klein, R. (2010). *Optimisation of ambient and high temperature asymmetric flow field-flow fractionation with dual/multi-angle light scattering and infrared/refractive index detection*. J Chromatography, **1217** (5), 722-730.

---

## Prof. Dr. M. Rehahn

### Begutachtete:

Ritter, H., Mondrzik, B.E., Rehahn, M. and Gallei, M. (2010). *Free radical homopolymerization of a vinylferrocene/cyclodextrin complex in water*. *Beilstein J Org Chem*, **6**, 60.

Xu, J., Bellas, V., Jungnickel, B., Stühn, B. and Rehahn, M. (2010). *Equilibrium Melting Temperature of Poly(ferrocenyl dimethylsilane) in Homopolymers and Lamellar Diblock Copolymers with Polystyrene*. *Macromol Chem Phys*, **211**, 1261-1271.

Xu, J., Bellas, V., Jungnickel, B., Stühn, B. and Rehan, M. (2010). *A Novel Crystallization Scheme in Poly[styrene-block-(ferrocenyl dimethylsilane)] Diblock Copolymers*. *Macromol Chem Phys*, **21**, 2276-2285.

Gallei, M., Tockner, S., Klein, R. and Rehan, M. (2010). *Silacyclobutane-Based Diblock Copolymers with Vinylferrocene, Ferrocenylmethyl Methacrylate and [1]Dimethylsilaferrocenophane*. *Macromol Rapid Commun*, **31**, 889-896.

Buchmeiser, M.R., Rehan, M., Haag, R. and Lendlein, A. (2010). *Polymers in Biomedicine and Electronics*. *Macromol Rapid Commun*, **31**, 1487-1491.

Gallei, M., Klein, R. and Rehan, M. (2010). *Silacyclobutane-Mediated Re-Activation of „Sleeping“ Polyvinylferrocene Macro-Anions: A Powerful Access to Novel Metalloblock Copolymers*. *Macromol*, **43**, 1844-1854.

### Sonstige:

Rehahn, M., Buchmeiser, M.R., Schnieders, F., et al. (2010). *Macromolecular Chemistry 2009*. *Nachrichten aus der Chemie*, **58**, 318-330.

## 9.5. Organische Chemie

### Prof. Dr. R. Berger

#### Begutachtete:

Isaev, T.A., Hoekstra, S. and Berger, R. (2010). *Lasercooled RaF as a promising candidate to measure molecular parity violation*. *Phys Rev A*, **82**, 052521.

Schmidt, J., Krekeler, C., Dommert, F., Zhao, Y., Berger, R., Delle Site, L. and Holm, C. (2010). *Ionic Charge Reduction and Atomic Partial Charges from First-Principles Calculations of 1,3-Dimethylimidazolium Chloride*. *J Phys Chem B*, **114**, 6150-6155.

---

Coriani, S., Kjærgaard, T., Jørgensen, P., Ruud, K., Huh, J. and Berger, R. (2010). *An Atomic-Orbital-Based Lagrangian Approach for Calculating Geometric Gradients of Linear Response Properties*. J Chem Theor Comput, **6**, 1028-1047.

Huh, J., Neff, M., Rauhut, G. and Berger, R. (2010). *Franck-Condon profiles in photodetachment-photoelectron spectra of HS<sup>2-</sup> and DS<sup>2-</sup> based on vibrational configuration interaction wavefunctions*. Mol Phys, **108**, 409-423.

Dommert, F., Schmidt, J., Krekeler, C., Zhao, Y.Y., Berger, R., Delle Site, L. and Holm, C. (2010). *Towards multiscale modeling of ionic liquids: From electronic structure to bulk properties*. J Mol Liquids, **152**, 2-8.

Diehl, F.P., Roos, C., Jankowiak, H.-C., Berger, R., Köhn, A., Diezemann, G. and Basché, T. (2010). *Combined Experimental and Theoretical Study of the Vibronic Spectra of Perylenecarboximides*. J Phys Chem B, **114**, 1638-1647.

Krekeler, C., Dommert, F., Schmidt, J., Zhao, Y.Y., Holm, C., Berger, R. and Delle Site, L. (2010). *Electrostatic properties of liquid 1,3-dimethylimidazolium chloride: role of local polarization and effect of the bulk*, Phys Chem Chem Phys, **12**, 1817-1821.

#### Sonstige: 4

Andrä, J., Berger, R., Jahn, U., Kaiser, M., Küpper, J., Schnepf, A. and Weichold, O. (2010). *Notizen aus der Chemie*, Nachrichten aus der Chemie, **58**, 1100-1102.

Huh, J. and Berger, R. (2010). *Trendbericht Theoretische Chemie 2009 – Vibronische Strukturmethoden*. Nachrichten aus der Chemie, **58**, 331-333.

#### **Prof. Dr. W.-D. Fessner**

##### Begutachtete:

Clapes, P., Fessner, W.-D., Sprenger, G.A. and Samland, A.K. (2010). *Recent Progress in Stereoselective Synthesis with Aldolases*. Curr Opin Chem Biol, **14**, 154-167.

Heyl, D., Rikowski, E., Hoffmann, R.C., Schneider, J.J. and Fessner, W.-D. (2010). *A „Clickable“ Hybrid Nanocluster of Cubic Symmetry*. Chem Eur J, **16**, 5544-5548.

Fabritz, S., Heyl, D., Bagutski, V., Empting, E., Rikowski, E., Frauendorf, H., Balog, I., Fessner, W.-D., Schneider, J.J., Avrutina, O. and Kolmar, H. (2010). *Towards Click Bioconjugations on Cube-Octameric Silsesquioxane Scaffolds*. Org Biomol Chem, **8**, 2212-2218

##### Sonstige:

Clapes Saborit, P. and Fessner, W.-D. (2010). *Enzymatic Direct Aldol Additions. Science of Synthesis. Stereoselective Synthesis 2 – Stereoselective Reactions of Carbonyl and Imino Groups*. Chapter 2.14. Molander, G. (Hrsg.), Thieme-Verlag, Stuttgart, 677-734.

---

## Prof. em. Dr. F.W. Lichtenthaler

### Sonstige:

Lichtenthaler, F.W. (2010). *Carbohydrates: Occurrence, Structures and Chemistry*. Ullmann`s Encyclopedia of Industrial Chemistry, online edition, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

Lichtenthaler, F.W. (2010). *Carbohydrates as Green Raw Materials*. Ullmann`s Encyclopedia of Industrial Chemistry, online edition, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

## PD Dr. R. Meusinger

### Begutachtete:

Meusinger, R. (2010). *Solution to spectroscopy challenge 14*. Anal Bioanal Chem, **396**, 1631-1632.

### Sonstige:

Meusinger, R. (2010). *NMR-Spektren richtig ausgewertet, 100 Übungen für Studium und Beruf*. Springer Verlag, ISBN: 978-3-642-01682-0.

## Prof. Dr. M. Reggelin

### Begutachtete:

Koolman, H., Heinrich, and Reggelin, M. (2010). *Novel Syntheses of Variably Substituted Pyrrolo[2,3-d]thiazoles*. Synthesis, **18**, 3152-3162.

Arnold, L., Marx, A., Thiele, C.M. and Reggelin, M. (2010). *Polyguanidines as Chiral Orienting Media for Organic Compounds*. Chem Eur J, **16**, 10342-10346.

### Sonstige:

Reggelin, M. (2010). *Paradigmenwechsel in der Wissenschaftsförderung?* Chemie&More, Succidia Verlag Darmstadt.

## Prof. Dr. B. Schmidt

### Begutachtete:

Pruessmeyer, J., Martin, C., Hess, F.M., Schwarz, N., Schmidt, S., Kogel, T., Höttecke, N., Schmidt, B., Sechi, A., Uhlig, S. and Ludwig, A. (2010). *A Disintegrin and Metalloproteinase 17 (ADAM17) Mediates Inflammation-induced Shedding of Syndecan-1 and -4 by Lung Epithelial Cells*. J Biol Chem, **285** (1), 555-564.

---

Höttecke, N., Ludwig, A., Foro, S. and Schmidt, B. (2010). *Improved Synthesis of ADAM10 Inhibitor GI254023X*. *Neurodegenerative Disease*, **7** (4), 232-238.

Höttecke, N., Liebeck, M., Baumann, K., Schubel, R., Winkler, E., Steiner, H. and Schmidt, B. (2010). *Inhibition of  $\gamma$ -secretase by the CK1 inhibitor IC261 does not depend on CK1*. *Bioorg Med Chem Lett*, **20** (9), 2958-2963.

Burgold, S.; Bittner, T., Dorostkar, M.M., Kieser, D., Fuhrmann, M., Mitteregger, G., Kretschmar, H., Schmidt, B. and Herms, J. (2010). *In vivo multiphoton imaging reveals gradual growth of newborn amyloid plaques over weeks*. *Acta Neuropathol*, **121** (3), 327-335.

#### **PD Dr. C.M. Thiele**

##### Begutachtete:

Böttcher, B., Schmidts, V., Raskatov, J.A. and Thiele, C.M. (2010). *Determination of the Conformation of the Key Intermediate in an Enantioselective Palladium-Catalyzed Allylic Substitution from Residual Dipolar Couplings*. *Angew Chem Int Ed*, **49**, 205-209.

Marx, A., Böttcher, B. and Thiele, C.M. (2010). *Enhancing the Orienting Properties of Poly( $\gamma$ -benzyl-L-glutamate) by means of Additives*. *Chem Eur J*, **16**, 1656-1663.

Arnold, L., Marx, A., Thiele, C.M. and Reggelin, M. (2010). *Polyguanidines as Chiral Orienting Media for Organic Compounds*. *Chem Eur J*, **16**, 10342-10346.

Reinscheid, U.M., Köck, M., Cychon, C., Schmidts, V., Thiele, C.M. and Griesinger, C. (2010). *The Absolute Configuration of Dibromopalau'amine*, *Eur J Org Chem*, 6900-6903.

#### **9.6. Biochemie**

##### **Prof. Dr. N.A. Dencher**

##### Begutachtete:

van Diepeningen, A.D., Maas, M.F.P.M., Huberts, D.H.E.W., Goedbloed, D.J., Engelmoer, D.J.P., Slakhorst, M., Koopmanschap, A.B., Krause, F., Dencher, N.A., Sellem, C.H., Sainsard-Chanet, A., Hoekstra, R.F. and Debets, A.J.M. (2010). *Calorie restriction causes healthy life span extension in the filamentous fungus *Podospora anserina**. *Mech Ageing Develop*, **131**, 60-68.

Frenzel, M., Rommelspacher, H., Sugawa, M.D. and Dencher, N.A. (2010). *Ageing alters the supramolecular architecture of OxPhos complexes in rat brain cortex*. *Exp Gerontol*, **45**, 563-572.

Maas, M.F.P.M., Sellem, C.H., Krause, F., Dencher, N.A. and Sainsard-Chanet, A. (2010). *Molecular gene therapy: Overexpression of the alternative NADH dehydrogenase *NDI1* restores overall physiology in a fungal model of respiratory complex I deficiency*. *J Mol Biol*, **399**, 31-40.

---

Buchsteiner, A., Hauß, T., Dante, S. and Dencher, N.A. (2010). *Alzheimer´s disease amyloid-β peptide analogue alters the ps-dynamics of phospholipid membranes*. *Biochim Biophys Acta - Biomembranes*, **1798**, 1969-1976.

Sonstige:

Lechner, R.E., Pieper, J., Buchsteiner, A., Dencher, N.A and Hauß, T. (2010). *Biological-Function Related Dynamics in a Protein: Energy- and Real-Time Resolved QENS Studies of a Molecular Machine*. Proceedings of the Workshop on “Possible Scientific View from New Neutron Spectroscopy, Opportunities in J-PARC, Japan Atomic Energy Agency JAEA-Review, 33-38.

**Prof. Dr. H. Kolmar**

Begutachtete:

Kolmar, H. (2010). *In vivo enzyme immobilization by inclusion body display*. *Appl Environ Microbiol*, **76** (16), 5563-9.

Fabritz, S., Heyl, D., Bagutski, V., Empting, M., Rikowski, E., Frauendorf, H., Balog, I., Fessner, W.-D., Schneider, J.J., Avrutina, O. and Kolmar, H. (2010). *Towards click bioconjugations on cube-octameric silsesquioxane scaffolds*. *Org Biomol Chem*, **8** (9), 2212-2218.

Kolmar, H. (2010). *Engineering cystine knot miniproteins für diagnostic applications*. *Expert Rev Mol Diagn*, **10** (3), 361-368.

García Boy, R., Mier, W., Nothelfer, E.M., Altmann, A., Eisenhut, M., Kolmar, H., Tomaszowski, M., Krämer, S. and Haberkorn, U. (2010). *Sunflower Trypsin Inhibitor 1 Derivatives as Molecular Scaffolds for the Development of Novel peptidic Radiopharmaceuticals*. *Mol Imaging Biol*, **2** (4), 377-385.

Sommerhoff, C.P., Avrutina, O., Schmoldt, H.U., Gabrijelcic-Geiger, D., Diederichsen, U. and Kolmar, H. (2010). *Engineered cystine knot minoproteins as potent inhibitors of human mast cell tryptase beta*. *J Mol Biol*, **395** (1), 167-175.

Sonstige:

Kolmar, H., Steinmann, B., Christmann, A., Heiseler, T. and Fritz, J. (2010). *Ultra-high Throughput Screening for Lipase Enantioselectivity*. *G I T Laboratory Journal*, **1-2**, 26-27.

Kolmar, H. (2010) *Neue Wege zur Isolierung funktionsoptimierter Lipasen*. *Biospektrum*, 277-279.

---

## 10. Patente

---

### 10.1. Neuansmeldungen 2010

#### Prof. Dr. P. Claus

*Katalysator zur Hydrierung von wässrigen mehrwertigen Alkohollösungen*, A. Bienholz, P. Claus

*Katalysator zur selektiven Hydrierung von aromatischen Verbindungen zu Cycloolefinen*, F. Schwab, P. Claus

#### Prof. Dr. H. Kolmar

*Bispecific aptamers mediating tumour cell lysis*, A. Botz, L. Toleikis, R. Günther, B. Hock (Anmelder Merck KGaA)

*Aptamer labeled with <sup>19</sup>F for targeted molecular imaging by MRI*, B. Piater und Mitarbeiter Merck KGaA (Anmelder Merck KGaA)

#### Prof. Dr. H. Plenio

*Ethenolyse von Terpenen, die dreifach substituierte Doppelbindungen umfassen*, TM523

#### Prof. Dr. M. Reggelin

*Azaindole derivatives*, T. Heinrich, H. Koolman

#### Prof. Dr. M. Rehahn

*Verfahren zur Herstellung von (elektro)lumineszierenden, photoaktiven und oder elektrisch (halb)leitenden Polymeren*, T. Schwalm, M. Rehahn

#### Prof. Dr. B. Schmidt

*Verbindungen für die Diagnostik neuro-degenerativer Erkrankungen an der Retina*, B. Schmidt, D. Kieser, A. Boländer, R. Heyny-von Haussen, J. Herms

*Verbindungen für die Diagnostik neuro-degenerativer Erkrankungen am Riechepithel*, B. Schmidt, D. Kieser, A. Boländer, R. Heyny-von Haussen, J. Herms

#### Prof. Dr. J.J. Schneider

*Preparation of semiconductor films*, J.J. Schneider, R.W. Hoffmann und Mitarbeiter Merck KGaA (Anmelder: Merck KGaA)

*Functional Material for printed electronic components*, J.J. Schneider, R.W. Hoffmann und Mitarbeiter Merck KGaA (Anmelder Merck KGaA)

### 10.2. Bestand an erteilten Patenten und Ersterteilungen 2010

	Bestand	Ersterteilungen		Bestand	Ersterteilungen
B. Albert	2		H. Kolmar	3	
P. Claus	4		H. Plenio	3	
K.-P. Dinse	2		B. Schmidt	12	
P. Friedl	5		J.J. Schneider	3	
W. Haase	15	1	M. Rehahn	4	
C. Hess	1		H. Vogel	31	

---

---

## 11. Herausgebertätigkeiten

---

**Prof. Dr. B. Albert**

European Editor: *Solid State Sciences*

**Prof. Dr. M. Biesalski**

Editorial Board Member: *The Open Journal of Macromolecules*

Editorial Board Member: *Soft Materials*

**Prof. i.R. Dr. J. Brickmann**

Editorial Board Member: *Journal of Molecular Modelling*

Editorial Board Member: *Journal of Mathematical Chemistry*

**Prof. Dr. G. Buntkowsky**

Editorial Board Member: *Solid State NMR Spectroscopy*

**Prof. Dr. M. Busch**

Editor: *Darmstädter Schriftenreihe der Polymerisationstechnik*

**Prof. Dr. P. Claus**

Editorial Board Member: *The Open Physical Chemistry Journal*

**Prof. i.R. 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. i.R. Dr. W. Haase**

Editorial Board Member: *Ferroelectrics*

Guest Editor: *International Journal of Molecular Sciences*

**Prof. em. Dr. F.W. Lichtenthaler**

Editorial Board Member: *Trends in Glycoscience and Glycotechnology*

**Prof. Dr. F. Müller-Plathe**

Editor in Chief: *Soft Materials*



---

**Prof. Dr. R. Schäfer**

Editor: *Bunsenmagazin*

**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. J.J. Schneider:**

Associate Editor: *Beilstein Journal of Nanotechnology*

---

---

## 12. Drittmittel

---

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

Nach Geldgebergrp.	Einnahmen in €	Ausgaben in €	Einnahmen in %	Ausgaben in %
LOEWE Summe	162.523,81	194.029,71	2,45	2,97
Bund Summe	1.170.722,12	1.156.937,79	17,67	17,70
DFG Summe	3.030.504,67	2.848.516,05	45,73	43,59
EU Summe	697.205,78	388.445,81	10,52	5,95
Industrie Summe	1.136.083,01	1.369.071,54	17,15	20,95
Sonstige Summe	429.370,04	577.955,04	6,48	8,84
<b>Gesamtergebnis</b>	<b>6.626.364,43</b>	<b>6.534.955,94</b>	<b>100,00</b>	<b>100,00</b>

Das Aufkommen ist gegenüber 2009 **um 16% 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. **402.500 €**.

Zu diesen versteckten Personalmitteln kommen diverse Zuwendungen, Geldspenden, Sachspenden, Schenkungen usw., die direkt an Arbeitsgruppen geleistet wurden. Diese beliefen sich auf ca. **31.000 €**.

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 **88.600 €** geschätzt. Der Hauptanteil (75.600 €) entfällt auf Messzeit am Neutronendiffraktometer des Helmholtz-Zentrum in Berlin (Prof. Dencher).

---

### **12.3. Gesamte Drittmittel 2010**

Zusammengerechnet belaufen sich die 2010 umgesetzten Drittmittel des Fachbereichs Chemie auf ca. **7.148.464 €**. 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 2010 neue Forschungsanträge gestellt, bzw. sind Kooperationsverträge eingegangen. Die 2010 neu zugesagten (Datum Bewilligungsbescheid, Kooperationsvertrag bzw. Forschungsauftrag) Drittmittel belaufen sich auf ca. **7.311.630 €**. 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. Stipendiaten und GastwissenschaftlerInnen am Fachbereich Chemie

---

**M.Sc. Serdar Akbayrak**

METU, Ankara, Türkei (Prof. Schneider)

**Mojtaba Amini**

Iran, Stipendium Iran (Prof. Plenio)

**Dr. Ahmet Awadallah**

Egyptian Petroleum Research Institute, Kairo, Ägypten (Prof. Schneider)

**Prof. Nicos Benteinitis**

Southwestern University, Texas USA (Prof. Müller-Plathe)

**Prof. David Brown**

University of Savoie, France (Prof. van der Vegt)

**M. Sc. Mukaddes Can**

BMBF-TÜBITAK IntenC-Programm, TUD-METU-Netzwerk, Ankara, Türkei (Prof. Hess)

**Kathy Chen**

Wellesley College, MA, DAAD-Stipendiant (Prof. van der Vegt)

**Yl Dong**

Stipendiant DAAD (Prof. Fessner)

**Prof. Dr. Hossein Eslami**

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

**Prof. Dr. Yury Galyametdinov**

Physical and Colloid Chemistry Department, Kazan State Technological Research University, Russia, DFG-Graduiertenkolleg (Prof. Haase)

**Prof. Prathap Haridoss**

IIT Madras, Indien (Prof. Schneider)

**Dipl.-Ing. Sven Heiles**

Doktorandenstipendium des FCI (Prof. Schäfer)

**Berg Hess**

University of Stockholm, Schweden (Prof. van der Vegt)

**Dr. Andrey Knyazev**

Physical and Colloid Chemistry Department, Kazan State Technological Research University, Russia, BMBF-IB, (Prof. Haase)

**Prof. Dr. Pradip Kr. Mandal**

Department of Physics, University of North Bengal Siliguri, Indien, BMBF-IB (Prof. Haase)

---

**Ph.D. Önder Metin**

METU, Ankara, Türkei (Prof. Schneider)

**Prof. Dr. Ademir Neves**

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Chemical Department, Florianopolis, Brasilien, BMBF-IB (Prof. Haase)

**Dr. Serghei Ostrovschi**

Institute of Applied Physics, Academy of Sciences of the Republic of Moldova, Chisinau, Moldova, DFG (Prof. Haase)

**Dr. Fedor Podgornov**

Nonlinear Optics Laboratory, South Ural State University Cheljabinsk, Russia (Prof. Haase)

**M.Sc. Amal Rashad**

Department of Chemistry, Alexandria University, Ägypten (Prof. Haase)

**Dr. Tomasz Ratajczyk**

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

**Dipl. Phys. Anya Ryzhkova**

Nonlinear Optics Laboratory, South Ural State University Cheljabinsk, Russland, BMBF-IB (Prof. Haase)

**Prof. Nahed M. Hawash Salem**

Department of Chemistry, Alexandria University, Ägypten, DFG (Prof. Haase)

**Dipl.-Ing. Volker Schmidts**

Studienstiftung des Deutschen Volkes (PD Dr. Thiele)

**Prof. Ping Sheng**

HongKong University, HKUST, Hong Kong (Prof. van der Vegt)

**Prof. Dr. Eduardo Aturo Soto-Bustamante**

Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile (Prof. Haase)

**Dr. habil. Zbigniew Tomkowicz**

Institute of Physics, Jagiellonian University, Krakow, Polen, DFG (Prof. Haase)

---

## 14. Extern beschäftigte MitarbeiterInnen des Fachbereichs Chemie

---

**Dipl. Ing. Jovina Addo-Mensa**

Doktorarbeit, VW Wolfsburg (Prof. Hess)

**Dipl. Chem. Sebastian Barth**

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Schneider)

**Dipl. Biol. Pia Dahm**

Doktorarbeit Fraunhofer IME Aachen (Prof. Fessner)

**Dipl.-Ing. Markus Gallei**

Doktorarbeit am DKI (Prof. Rehahn)

**M.Sc. Alice Julliard**

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Rehahn)

**Dr.-Ing. Roland Klein**

Post-Doc am DKI (Prof. Rehahn)

**Dipl.-Ing. Angela Lennert**

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Rehahn)

**Dipl.-Ing. Maja Markovic**

Doktorarbeit am DKI (Prof. Rehahn)

**Dipl.-Ing. Regina Sander**

Doktorarbeit am DKI (Prof. Rehahn)

**Dipl. Biochem. Hans Schmeer**

Doktorarbeit Fraunhofer IME Aachen (Prof. Fessner)

**Dipl. Chem. Alexander Ungefug**

Doktorarbeit am DKI (Prof. Rehahn)

**Dipl.-Ing. Stefan Urfels**

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Vogel)

**M.Sc. Sullivan Dias Borges Vianna**

Doktorarbeit MPI für Polymerforschung (Prof. Müller-Plathe)

**Dipl.-Ing. Martin Weber**

Doktorarbeit Merck KGaA (Prof. Vogel)

**Dr. Matthias Wittemann**

Post-Doc am DKI (Prof. Rehahn)

---

---

## 15. Preise an Mitglieder des Fachbereichs 2010

---

**Prof. Dr. Barbara Albert**

**Vizepräsidentin der Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V.**

**Dr. Torsten Gutmann** (Prof. Buntkowsky)

**Teilnehmer der 60. Nobelpreisträger-Tagung in Lindau** - auserwählt aus 20.000 Studierende/Nachwuchswissenschaftler aus 70 Nationen

**Dipl.-Ing. Sven Heiles** (Prof. Schäfer)

**Alarich-Weiss-Preis 2010** für seine Diplomarbeit *Molekularstrahlexperimente an reinen und Cs-dotierten  $Bi_N$ -Clustern* am Ernst-Berl- und Eduard-Zintl-Institut

**Dipl.-Ing. Torsten Heinlein** (Prof. Schneider)

**Karl und Marie Schack-Stiftung** - Förderung seiner Doktorarbeit im interdisziplinären Themengebiet funktioneller bio-/nanostrukturierter Hybridmaterialien

**Dipl.-Ing. Thomas Hermann** (Prof. Busch)

**CAST Directors Award** - Beste Poster-Präsentation auf dem AIChE Annual Meeting 2010 *Modeling of Tubular High-Pressure Polyethylene Reactors*

**Dr. Nicole Höttecke** (Prof. Schmidt)

**Preis der Familie Bottling-Stiftung** für ihre Dissertation *Entwicklung und Synthese von  $\gamma$ -Sekretase-Modulatoren zur Behandlung von Morbus Alzheimer*

**Dipl.-Ing. Miriam Liebeck** (Prof. Vogel)

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

**Dipl.-Ing. Serena Nickel** (Prof. Rehahn)

**Preis der Vereinigung von Ehemaligen und Freunden des DKI Darmstadt e.V.** für ihre herausragende Diplomarbeit *Untersuchungen zur photoinitiierten GILCH-Polymerisation*

---

## Posterpreis Makromolekulares Kolloquium Freiburg

**M. Gallei, R. Klein, M. Rehahn**

*Synthesen und Morphologien höchst definierter Blockcopolymere auf Basis von Vinylferrocen*

## Prof. Dr. Matthias Rehahn

**Stellvertretender Vorsitzender des Wissenschaftlichen Rates der AIF (Allianz Industrie Forschung)**

## Dipl.-Ing. Frederik Stober (Prof. Albert)

**Bester Vortrags-Preis** auf dem Thermoelectric Symposium des MRS Fall Meetings in Boston  
*High Seebeck Coefficient in ScB<sub>2-30</sub>, a Boron-rich Boride*

## PD Dr. Christina M. Thiele

**Heinz Maier-Leibnitz-Preis** für ihre herausragenden Arbeiten auf dem Gebiet der NMR-spektroskopischen Strukturbestimmung organischer Verbindungen in anisotropen Medien mittels residualer dipolarer Kopplungen (RDCs)

## PD Dr. Christina M. Thiele

**Starting Independent Researcher Grant** der EU für ihre wissenschaftliche Exzellenz und zukunftsweisende Projekte auf dem Gebiet der NMR-spektroskopischen Strukturbestimmung organischer Verbindungen in anisotropen Medien mittels residualer dipolarer Kopplungen (RDCs)

## Dr. Alexander Titz (Prof. Schmidt)

**Klaus Grohe-Preis** in Anerkennung seiner vorbildlichen Leistungen auf dem Gebiet der Wirkstoffforschung

## Dipl.-Ing. Nicolai Wörz (Prof. Claus)

**DECHEMA-Studentenpreis** für seine hervorragende Diplomarbeit *Platin-Bismut/kohle katalysierte Oxidation von Glycerol: Reaktionsmechanismus und kinetische Modellierung* in Technischer Chemie



---

## **Dr. Klaus Wannowius und Prof. Dr. Herbert Plenio**

**1. Platz des Athene Preises für Gute Lehre** der Carlo und Karin Giersch-Stiftung für die Veranstaltung *Studenten experimentieren für Grundschüler (StudEx)*

## **Preisträger der Dr. Anton-Keller-Stiftung**

Monika Heilmann (Diplom), Peter Hörz (Diplom, Prof. Schäfer), Sabrina Kemmerer (B.Sc., Prof. Müller-Plathe), Alexis Krupp (Diplom, Prof. Reggelin), Bernhard Schmidt (Diplom, Prof. Rehahn) und Ali Shayeghi (Diplom, Prof. Schäfer)

## **Wilhelm Jost-Gedächtnismedaille**

Prof. Dr. Manfred Martin, international ausgewiesener Physikochemiker, 1994 bis 2000 Professor am Fachbereich Chemie

## 16. Beteiligung an laufenden Verbundprojekten

Name des Verbundes	Geldgeber	Teilnehmer
Excellence Cluster 259: <i>Smart Interfaces – understanding and designing fluid boundaries</i>	DFG	van der Vegt, N., Müller-Plathe, F., Rehahn, M.
Forschergruppe 934: <i>NMR-Spektroskopische Bestimmung relativer und absoluter Konfigurationen gelöster Moleküle in orientierenden Medien</i>	DFG	Reggelin, M., Thiele, C.M.
SPP 1191: <i>Ionische Flüssigkeiten – Multiscale Simulations on the Structure and Dynamics of Ionic Liquids</i>	DFG	Berger, R., Müller-Plathe, F.
SFB 595: <i>Elektrische Ermüdung in Funktionswerkstoffen</i>	DFG	Buntkowsky, G., Hess, C., Rehahn, M.
Graduiertenkolleg 1037: <i>Tunable Integrated Components in Microwave Technology and Optics (TICMO)</i>	DFG	Haase, W.
SPP 1369: <i>Polymer-Festkörper-Kontakte: Grenzflächen und Interphasen</i>	DFG	Müller-Plathe, F., Rehahn, M., Schneider, J.J.
SFB-TRR75: <i>Tropfendynamische Prozesse unter extremen Umgebungsbedingungen, Teilprojekt A4: Molekulardynamische Simulationen der Tropfenverdampfung unter Nichtgleichgewichtsbedingungen</i>	DFG	Müller-Plathe, F., van der Vegt, N.
SPP 1420: <i>Biomimetic Materials Research: Functionality by Hierarchical Structuring of Materials</i>	DFG	van der Vegt, N.
<i>Hybridstrukturen aus Phosphoolivinen des Typs LiMPO4 mit C-Nanofilamenten für Li-Ionen-Batterien</i>	DFG	Schneider, J.J.
Emmy-Noether-Programm: <i>Struktur-Aktivitäts-Beziehungen von biologisch oder katalytisch aktiven Spezies aus der durch NMR bestimmten 3D-Struktur; integriert in der Forschergruppe 934</i>	DFG	Thiele, C.M.
Indo-German Cooperation	DFG	Schneider, J.J.
<i>Simulationen zur Morphogenese von nanostrukturierten Biomaterialien</i>	DFG	Brickmann, J.
<i>CO<sub>2</sub>RRECT – Verwertung von CO<sub>2</sub> als Kohlenstoff-Baustein unter Verwendung überwiegend regenerativer Energien</i>	BMBF	Claus, P.
<i>GSI: Induktion und Transmission von genetischen Schäden nach Hoch-LET Bestrahlung: In vivo und in vitro Untersuchungen</i>	BMBF	Dencher, N.A.

Name des Verbundes	Geldgeber	Teilnehmer
<i>GerontoSys: Mitochondriale Netzwerke von Signalwegen bei der Alterung und der Lebensspannenkontrolle- ein systembiologischer Ansatz</i>	BMBF	Dencher, N.A.
<i>CO<sub>2</sub>-DREAM-Reaction</i>	BMBF	Claus, P.
Molecular Diagnosis of Neurodegenerative Disease in the Eye (MINDe)	BMBF	Schmidt, B.
<i>Bioindustrie 2021: Biotechnologische Produktion von makrocyclischen Moschusriechstoffen</i>	BMBF	Fessner, W.-D., Kolmar, H.
<i>Effiziente Produktion von neuen chiralen Substanzen durch verbesserte industrielle Aldolasen</i>	BMBF	Fessner, W.-D.
<i>Flüssigkristalline Nanokomposite</i>	BMBF	Haase, W.
<i>Neue nanomagnetische Materialien für biomedizinische und katalytische Anwendungen</i>	BMBF	Haase, W.
<i>Röntgenographische und elektrooptische Untersuchungen neuer LC-Hybridmaterialien für optoelektronische Anwendungen</i>	BMBF	Haase, W.
<i>Dispersionen von Nanopartikeln in flüssigen Kristallen</i>	BMBF	Haase, W.
<i>Erforschung neuer diagnostischer Tracer mit Hilfe biotechnologischer Verfahren - BIOTRACE</i>	BMBF	Kolmar, H.
<i>Bioindustrie 2021: Funktions- und strukturbasierte Aufreinigung und Analytik werthaltiger Chemikalien und Pharmaprodukte - BIOPUR</i>	BMBF	Kolmar, H.
<i>Bioindustrie 2021: Biotechnologische Produktion von makrocyclischen Moschusriechstoffen</i>	BMBF	Kolmar, H., Fessner, W.-D.
<i>Entwicklung einer neuen Downstreamprozesskette von biogenen Rohstoffen zu C2- und C4-Oxygenaten</i>	BMBF	Vogel, H.
GSK3 in Neuronal Plasticity and Neurodegeneration (NeuroGSK3)	EU	Schmidt, B.
<i>Nanomodel: Multi-Scale Modelling of Nano-Structured Polymeric Materials: From Chemistry to Materials Performance</i>	EU	Müller-Plathe, F.
<i>CM0701: Cascade Chemoenzymatic Processes - New Synergies Between Chemistry and Biochemistry</i>	EU/COST	Fessner, W.-D.

Name des Verbundes	Geldgeber	Teilnehmer
HMWK LOEWE-AdRIA (Adaptronik-Research, Innovation, Application): <i>adaptives Auto, adaptiver Tilger</i>	LOEWE-AdRIA	Rehahn, M.
Nano-Drucksensoren - Auf dem Weg zur taktilen künstlichen Haut. Ein nanostrukturierter Drucksensor auf der Basis von Kohlenstoffröhren	LOEWE	Schneider, J.J.
Mikro-Nano-Integration von Mikrobauteilen mit nanoskaligen Loten (MiNaLo)	LOEWE	Schneider, J.J.
Erarbeitung der Verfahrensgrundlagen zur einstufigen Konversion von alkoholischen Fermenterausträgen zu den entsprechenden reinen Olefinen	FNR	Vogel, H.
Kontinuierliche Technikumsanlage zur Herstellung von Biokohle aus Biomasse	ANTACO/Hessen Agentur	Vogel, H.
Wissenschaftliche und technische Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Neutronenstreuung	Helmholtz-Zentrum Berlin GmbH	Dencher, N.A.
Forschungsschwerpunkt Nanomaterialien	TUD	Schneider, J.J.
<i>TUD-METU Research and Educational Network on Nanomaterials and Nanotechnology</i>	TUD-METU	Schneider, J.J.
<i>Directed evolution of neuraminic acid aldolase</i>	DAAD/ARC	Fessner, W.-D.
Projektbezogener Personenaustausch	DAAD/China	Fessner, W.-D.

---

## 17. Kooperationen

---

Die von den einzelnen Arbeitsgruppenleitern benannten „bis zu 3 wichtigsten Kooperationspartner“ verteilen sich 2010 nach Art und Geographie wie folgt:

	Industrie	Akademisch	Gesamt
Darmstadt	4	6	10
Deutschland	7	21	28
Europa	1	8	9
Nordamerika, Australien, Japan	2	2	4
Welt	-	9	9
Gesamt	14	46	60
<b><u>In Prozent:</u></b>			
	Industrie	Akademisch	Gesamt
Darmstadt	6,8	10,2	17
Deutschland	11,8	35,2	47
Europa	1,7	13,3	15
Nordamerika, Australien, Japan	3,0	3,0	6
Welt	-	15,0	15
Gesamt	23,3	76,7	100

---

## 18. Veranstaltungen

---

von Mitgliedern des Fachbereichs (mit-)organisiert

**Prof. Dr. B. Albert, Frauenbeauftragte des Fachbereichs Chemie**

*Chemikerinnen – Wo geht es hin?*, Vortrags- und Diskussionsveranstaltung mit dem Arbeitskreis Chancengleichheit in der Chemie der GDCh für Studierende, Promovierende, Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, Darmstadt, März 2010

**Prof. Dr. M. Biesalski**

1. Darmstädter Papierkolloquium, TU Darmstadt, April 2010

Sommerschule Makromolekulare Chemie u. Papierchemie, Heidelberg, Mai 2010

**Dr.-Ing. H.-J. Bär, Prof. Dr. F. Müller-Plathe**

Jahrestreffen des DFG Schwerpunkts 1369, Dechema Frankfurt, Juli 2010

Workshop: *Zum Status der Biophysik in Deutschland*, Akademie der Wissenschaften und der Literatur Mainz, November 2010

**Prof. Dr. G. Buntkowsky**

Chairman XV<sup>th</sup> QAMTS International Workshop, Darmstadt, September 2010

**Prof. Dr. P. Claus**

ConNeCat – Südwestdeutscher Katalyse-Lehrverbund, Neustadt/Weinstraße, September 2010

**Prof. Dr. W.-D. Fessner**

DECHEMA Jahrestagung, Open Space Workshop Industrielle Biotechnologie, Mannheim, September 2010

**Prof. i.R. Dr. W. Haase**

SPIE Conference Photonics West, Program Committee Emerging Liquid Crystal Technologies, San Francisco, USA, Januar 2010

23<sup>th</sup> International Conference on Liquid Crystals, Krakau, Polen, Juli 2010

**PD Dr. R. Meusinger**

International Summer School in Molecular Spectroscopy: NMR of Terpenoids and of Miscellaneous Compounds, Oppurg, August 2010

Experimente zur Wissenschaftshistorischen Stadtführung: *Auf den Spuren der Chemie in Darmstadt*, Juni und September 2010

Basiskurs NMR Spektrenauswertung, GDCh, Darmstadt, April 2010

Fortgeschrittenenkurs NMR Spektrenauswertung, GDCh, Darmstadt, Oktober 2010

Experimentalvorlesung für Schüler, Merck/FB Chemie der TU Darmstadt, Juni 2010

---

**Prof. Dr. M. Reggelin**

Experimentalvorlesung für Schüler, Merck/FB Chemie der TU Darmstadt, Juni 2010

**Prof. Dr. M. Rehahn**

Spring School SPP 1369, Fulda, März 2010

Besuch der der Nachwuchsgenies der Merck KGaA mit Filmbeitrag im DKI

Schnuppertage für Schülerinnen

Messestand des DKI auf der Kunststoff-Messe in Düsseldorf

**Prof. Dr. R. Schäfer**

Programmkomitee der Bunsentagung, Bielefeld, Mai 2010

**Prof. Dr. J.J. Schneider**

Material Science and Engineering Tagung, Darmstadt, August 2010

4<sup>th</sup> TU Darmstadt-METU Joint Graduate Workshop on Nanotechnology, Darmstadt, April 2010

6<sup>th</sup> EFCATS Summer School *Catalysis & Surface Science for Renewables & Energy*, Izmir, Türkei, September 2010

Nanotechnologieforum Hessen, Institutsführung mit Vortrag, Darmstadt, Nov./Dez. 2010

**PD Dr. C.M. Thiele**

Organisationskomitee des Deutsch-chinesischen Nachwuchswissenschaftler Treffen: *Sino-German Frontiers of Science Meeting*, 2010

Diskussionstagung der Fachgruppe Magnetische Resonanz der GDCh, 2010

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

VOTCA workshop am Center of Smart Interfaces, Darmstadt, Mai 2010

5<sup>th</sup> Rhein-Main Modeling Meeting, Exlibris Konferenztage, Darmstadt, Dezember 2010

**Prof. Dr. H. Vogel**

Klausurtagung des Fachbereichs Chemie, Michelstadt, Oktober 2010

28. DECHEMA-Jahrestagung der Biotechnologen und ProcessNet- Jahrestagung, Aachen, 2010

Jahrestreffen Reaktionstechnik, Würzburg 2010

PhD-Workshop: Numerik in der chemischen Reaktionstechnik, Darmstadt, Dezember 2010

PhD-Workshop: Kinetische Simulation mit Hilfe von Presto, Darmstadt, Dezember 2010

Exkursion zur Südzucker AG, Besichtigung einer Bioethanolanlage, Zeitz, Juli 2010

ConNeCat – Südwestdeutscher Katalyse-Lehrverbund, Neustadt/Weinstraße, September 2010

---

## 19. Außenwirkung

---

### **Prof. Dr. B. Albert**

Vizepräsidentin der GDCh, Vorstandsmitglieder der GDCh, GDCh Vorsitzende der Fachgruppe *Festkörperchemie und Materialforschung*, Mitglied im Vorstand der ProcessNet-Fachsektion *Anorganisch-technische Chemie* (DECHEMA), Mitglied der Auswahlkommission für Doktoranden des DAAD, Merck-TUD-Juniorlabor

### **Dr.-Ing. H.-J. Bär**

hobit, TUDay, Schnupperstudium

### **Prof. Dr. M. Biesalski**

Koordinator des LOEWE Forschungsschwerpunktes Soft Control  
Mitglied des Clusters Papierforschung, München

### **Prof. em. Dr. J. Brickmann**

Geschäftsführer MOLCAD GmbH, Gesellschafter und wissenschaftlicher Direktor der succidia AG

### **Prof. Dr. G. Buntkowsky**

Mitglied der Unterrichtskommission der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie, Mitglied der Auswahlkommission für Postdoktoranden des DAAD

### **Prof. Dr. M. Busch**

Mitglied im ProcessNet-Fachausschuss für Hochdrucktechnik (DECHEMA und VDI-GVC), Mitglied in der EFCE-Working Party on Polymer Reaction Engineering, Mitglied in der IUPAC Working Party on Modeling of Polymerization Kinetics and Processes

### **Prof. Dr. P.Claus**

Mitglied im Kompetenznetzwerk ConNeCat – Südwestdeutscher Katalyse-Lehrverbund, Mitglied der GeCatS-Kommission (GermanCatalysisSociety), Gutachter der Alexander von Humboldt-Stiftung

### **Prof. Dr. W.-D. Fessner**

Vertrauensdozent des Fonds der Chemischen Industrie/VCI

### **Prof. Dr. P. Friedl**

Wissenschaftlicher Beirat der Firma CytoTools AG, Darmstadt

### **Prof. Dr. H. Kolmar**

Wissenschaftlicher Beirat der Firma Sloning BioTechnology GmbH, Medienbericht zum Darwin Jahr im Darmstädter Echo



---

### **Prof. em. Dr. G. Luft**

Mitglied im ProcessNet-Fachausschuss für Sicherheitstechnik (DECHEMA und VDI-GVC), Mitglied im Beirat der Faudi-Stiftung

### **PD Dr. R. Meusinger**

Experimentalshow für die Teilnehmer und Jury des Landeswettbewerbs „Jugend forscht“, Merck-TUD Experimentalvorlesung für Schüler, Weihnachtsvorlesung des Fachbereichs Chemie

### **Prof. Dr. F. Müller-Plathe**

Mitglied der mathematisch-naturwissenschaftlichen Klasse der Akademie der Wissenschaften und der Literatur Mainz, Vertrauensdozent der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie

### **Prof. Dr. S. Neumann**

Mitglied der internationalen Expertenkommission zur Evaluierung der Ergebnisse im BMBF-Förderprogramm *NGFN Plus Cancer*, Sprecher der internationalen Expertenkommission für die Projektvorschläge im BMBF-Förderprogramm *Molekulare Diagnostik*, Sprecher der internationalen Expertenkommission für die Projektvorschläge im BMBF-Förderprogramm *CancerSys*, Mitglied der internationalen Gutachterkommission für das BMBF-Förderprojekt *Nationales Kompetenzzentrum für Translationale Tumorforschung*, Leiter in der Expertenkommission zur Evaluierung der Projektvorschläge im BMBF-Förderprogramm *Validierung innovativer Potentiale aus der wissenschaftlichen Forschung (VIP)*, Mitglied der wissenschaftlichen Beiräte der Medizinischen Fakultät der Universität Rostock, des Proteomforschungszentrums der Universität Tübingen, des Exzellenzclusters *CellNetworks* der Universität Heidelberg, des Spitzenforschungclusters *Taschentuchlabor* der Universität Potsdam, des Systembiologieforschungsverbundes *Viroquant* der Universität Heidelberg und des Forschungszentrums *BioQuant* der Universität Heidelberg, Mitglied des internationalen wissenschaftlichen Beirates für das BMBF-geförderte nationale Forschungsnetz *The virtual liver*, Mitglied des internationalen Expertengremiums des Österreichischen BMBF für das nationale Förderprogramm *GEN-AU III*, Mitglied des internationalen wissenschaftlichen Beirates für das EU-FP 6 –Forschungsverbundprojektes *Growthstop* (Tumorforschung), Mitglied des Expertengremiums zur Auswahl der Projekte im Businessplan-Wettbewerb *VentureCup* des Landes Mecklenburg-Vorpommern

### **Prof. Dr. H. Plenio**

StudEx Veranstaltungen im Rahmen des AC-Grundpraktikums für Chemielehrerstudierende

### **Prof. Dr. M. Reggelin**

Merck-TUD Experimentalvorlesung für Schüler, Weihnachtsvorlesung des Fachbereichs Chemie

---

### **Prof. Dr. M. Rehahn**

Leiter des Deutschen Kunststoff Instituts (DKI), AiF-Gutacher, Vorsitzender der Gutachtergruppe 1 der AiF, Stellvertretender Vorsitzender des Vorstands des Wissenschaftlichen Rates der AiF, Mitglied des Präsidiums der AiF, Mitglied des Vorstandsrates der Deutschen Kautschuk-Gesellschaft, Mitglied des Aufsichtsrates des Fach-informationszentrums FIZ Chemie Berlin, Mitglied des Technisch-Wissenschaftlichen Beirates der HZG (Helmholtz-Gemeinschaft, Geesthacht), Vorsitzender des Technisch-Wissenschaftlichen Beirates der GKSS (Helmholtz-Gemeinschaft, Geesthacht), Mitglied des Technisch-Wissenschaftlichen Beirats des Leibniz-Instituts für Polymerforschung (IPF, Dresden), Sprecher der TU Darmstat im NanoNetzWerk Hessen

### **Prof. Dr. B. Schmidt**

Fernsehbericht in der Deutschen Welle zur Alzheimer Forschung

### **Prof. Dr. J.J. Schneider**

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

### **PD Dr. C.M. Thiele**

Mitglied des Vorstandes der GDCh-Fachgruppe *Magnetische Resonanzspektroskopie*, Expertengesprächsrunde der DFG zu NMR-Großforschungsinstrumenten, Mitglied des GDCh-Auswahlkomitees für RISE

### **Prof. Dr. H. Vogel**

Vorsitzender des Arbeitsausschusses *Technische Reaktionen* der DECHEMA

### **Dr. K. Wannowius**

StudEx Veranstaltungen im Rahmen des AC-Grundpraktikums für Chemielehrerstudierende, Chemie für Schüler, Merck – TU Darmstadt– Juniorlabor, Schnuppertage für Schülerinnen, Lehrerfortbildungsveranstaltungen

---

## 19.1. Beratungstätigkeit für Firmen, Verbände, etc.

Prof. Dr. M. Biesalski:	Unternehmen der Papierindustrie, u.a. Rhodia Acetow GmbH
Prof. i.R. J. Brickmann:	Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden
Prof. Dr. M. Busch:	größere nationale und internationale Industrieunternehmen
Prof. Dr. P. Friedl:	Wissenschaftlicher Beirat Cyto Tools AG
Prof. Dr. H. Kolmar:	zwei große Pharma- und Biotechnologieunternehmen in Deutschland und Großbritannien, ein Biotechunternehmen in Tschechien
PD Dr. R. Meusinger:	Merck KGaA und Zedira GmbH
Prof. Dr. F. Müller-Plathe:	LT Concepts GmbH
Prof. Dr. S. Neumann:	Mitglied der Task Force des Technologieparks Heidelberg für die Planung eines Sino-German Life Science Research Centers mit der Universität Peking und Berater der MTZ-Stiftung zur Verleihung von Promotionspreisen für Forschung im Gebiet Medizinische Systembiologie
Prof. Dr. B. Schmidt:	Hoffmann-La Roche AG, BMBF und Mentor im SciMento-Programm
Prof. Dr. H. Vogel:	Wacker Chemie AG

---

## 20. Laufende und geplante Forschungsvorhaben

---

Drittmittelanträge, Industriekooperationen

### **Prof. Dr. B. Albert**

DFG AL 536/9-1, *Superconductivity and magnetism in the phase diagram of bulk  $\text{La}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$  investigated by muon-spin spectroscopy and neutron scattering*

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

DFG Graduiertenkolleg 611, *Design und Characterisation of Functional Materials*

Merck KGaA, *Pigmentforschung*

### **Prof. Dr. R. Berger**

Beilsteinstiftung, *NanoBIC*

Volkswagenstiftung, *Chemistry that Matters*

German-Israeli-Foundation, *Metal complexes and metal clusters: Chirality studies*

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

### **Prof. Dr. M. Biesalski**

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

VDP, *Papier 2050: Molekulare & mesoskopische Effekte der Faser-Füllstoff-Retentionsmittel Interaktion*

DFG, *Polymer ummantelte Peptidnanoröhren: Synthese, Strukturuntersuchungen und Eigenschaften*

### **Prof. i.R. Dr. J. Brickmann**

DFG, *Simulationen zur Morphogenese von nanostrukturierten Biomaterialien*

### **Prof. Dr. G. Buntkowsky**

DFG, *Solid-state NMR studies of cofactor-protein systems with functional hydrogen bonds*

DFG, *Design and Characterization of Metal Catalysts and Complex Catalysts for clean Synthesis in aqueous Medium immobilized on Mesoporous Supports*

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

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

DFG, *Solid State NMR studies on the mechanisms of immobilized organic-inorganic metal containing heterogenous catalysts*

DFG, *Charakterisierung der Struktur-Eigenschaftsbeziehungen elektrischer Funktionsmaterialien mit Festkörpers-NMR-Verfahren*

BMBF, *Magnetic Resonance Assisted Photodynamic Therapy (MR-PDT)*

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

---

**Prof. Dr. M. Busch**

Basell, *Modellierung technischer Hochdruck-LDPE Reaktoren*

Dow, *Ethylenhochdruckpolymerisation*

Innospec Limited, *Hochdrucksynthese von Fließverbesseren*

Japan Polyethylene Corporation

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

**Prof. Dr. P. Claus**

BMBF-Verbundprojekt, *CO<sub>2</sub>-DREAM Reactions*

BMBF-Verbundprojekt *CO<sub>2</sub>RRECT*

3 Industrieprojekte zur *Heterogenen Katalyse und Reaktionstechnik*

Projekt mit der Fritz und Margot Faudi-Stiftung

Industrieprojekt zur Heterogenen Katalyse und Reaktionstechnik

**Prof. Dr. N.A. Dencher**

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

BMBF, GSI, *Induktion und Transmission von genetischen Schäden nach Hoch-LET Bestrahlung: In vivo und in vitro Untersuchungen*

DFG Graduiertenkolleg, *Molekulare und zelluläre Reaktionen auf ionisierende Strahlung*

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

**Prof. Dr. W.-D. Fessner**

BMBF-Verbundprojekt Bioindustrie 2021, *Biotechnologische Produktion von makrocyclischen Moschusriechstoffen*

BMBF-Verbundprojekt, *Effiziente Produktion von neuen chiralen Substanzen durch verbesserte industrielle Aldolasen*

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

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

DAAD, *Enzym-Katalysierte Synthese von Sialokonjugaten*

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

**Prof. i.R. Dr. W. Haase**

DFG, *Elektrooptische und dielektrische Eigenschaften von flüssigkristallinen Nanokompositen*

DFG, *Beihilfe zur Initiierung einer bilateralen Kooperation mit Moldawien*

DFG, *Beihilfe zur Initiierung einer bilateralen Kooperation mit Ägypten*

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

---

BMBF/ IB, *Defektfreie und schockstabile ferroelektrische Flüssigkristalldisplays von hoher optischer Qualität, basierend auf neuen ferroelektrischen Flüssigkristallen*  
BMBF/ IB, *Neue nanomagnetische Materialien für biomedizinische und katalytische Anwendungen*  
BMBF/ IB, *Flüssigkristalline Nanokomposite*  
BMBF/ IB, *Dispersion von Nanopartikeln in flüssigen Kristallen*  
BMBF/ IB, *Röntgenographische und elektrooptische Untersuchungen neuer LC/Hybridmaterialien für elektrooptische Anwendungen*

**Prof. Dr. C. Hess**

DFG-SFB595, *In situ Diagnostik von Interkalationsbatterien mittels Ramanspektroskopie*  
DFG, *Mechanismus der NO<sub>x</sub>-Einspeicherung in Cerdioxidhaltigen Speicher-Reduktions-Katalysator-Materialien*

**Prof. Dr. H. Kolmar**

BMBF, *Bioindustrie 2021: Funktions- und strukturbasierte Aufreinigung und Analytik erhaltiger Chemikalien und Pharmaprodukte*  
BMBF, *BIOTRACE: Biotechnologische Verfahren zur Identifizierung und Entwicklung neuer diagnostischer Tracer*  
BMBF, *SYMRISE: Biotechnische Produktion von makrocyclischen Moschusriechstoffen*  
DFG-SPP1177, *Directed Evolution to Optimize and understand Molecular Biocatalysts*  
DFG, *Funktionalisierung von Cystinknoten-Mikroproteinen durch Kombination chemischer und rekombinanter Synthesestrategien*  
Industrieprojekt mit Metabolic Explorer  
Industrieprojekt BionTech/TRON  
Industrieprojekt mit Merck KGaA

**Prof. Dr. F. Müller-Plathe**

DFG Excellence Cluster 259, *Smart Interfaces – understanding and designing fluid boundaries*  
DFG SPP 1155, *Wärmeleitfähigkeit von Polymer-Materialien durch Nichtgleichgewichts-Molekulardynamik Simulation*  
DFG SPP 1191, *Viscosities and other dynamic properties of ionic liquids by molecular dynamics simulations and structure-properties relations*  
DFG SFB-TRR75, *Molekulardynamische Simulation zur Tropfenverdampfung im nichtlinearen Antwortbereich*  
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*  
DFG, *Koordinationsantrag zum SPP 1369*  
DFG, *Berechnung der Grenzflächenspannung nanostrukturierter Oberflächen durch thermodynamische Integration*

---

DFG, *Untersuchung der Thermodiffusion in Flüssigmischungen und Polymerlösungen durch Molekulardynamik-Simulationen*

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

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

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

**Prof. Dr. H. Plenio**

DFG, *Modifizierte N-heterocyclische Carbene für die Olefin-Metathese*

DFG, *Zweiphasen-Katalyse: Metallkomplexe wasserlöslicher N-heterocyclischer Carbene*

DFG, *Paralleles Multisubstrat-Screening Pd-katalysierter Kupplungsreaktionen*

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

**Prof. Dr. M. Reggelin**

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

Industrieprojekt auf dem Gebiet der *Synthese neuartiger N-Heterocyclen als Template für Kinase-Inhibitoren*

Industrieprojekt mit Merck KGaA im Bereich OLED

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

**Prof. Dr. M. Rehahn**

DFG SFB 595, *Elektrische Ermüdung in Funktionswerkstoffen*

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

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

DFG Excellence Cluster 259, *Smart Interfaces – understanding and designing fluid boundaries*

AiF, *Polyolefinblockcopolymer als Compatibilizer für Naturfaserkomposite*

AiF, *Polymilchsäure (PLA) für neue biobasierte Verpackungen*

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

**Prof. Dr. R. Schäfer**

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

DFG, *Bimetallische Cluster als Modellsysteme für die Legierungsbildung*

Projekt mit Fonds der Chemischen Industrie

**Prof. Dr. B. Schmidt**

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

EU, *GSK3 in Neuronal Plasticity and Neurodegeneratio (NeuroGSK3)*

DFG-Graduiertenkolleg *Strahlenbiologie: Molekulare und zelluläre Reaktionen auf ionisierende Strahlung*

---

### **Prof. Dr. J.J. Schneider**

BMBF, *IntenC: TUD-METU Research and Educational Network on Nanomaterials and Nanotechnology for Renewable Resources*

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

BMBF, *ELEMENT, Elektromechanische Sensoren mit eindimensionalen Nanoobjekten*

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

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

DFG 375/16-2 und 16-3, *Hybridstrukturen aus Phosphoolivinen des Typs  $\text{LiMPO}_4$  mit C-Nanofilamenten für Li-Ionen-Batterien*

DFG-DST Kooperationsprogramm, *Indo-German*

EMD Chemicals, *Innovation Lab Cambridge*

LOEWE III, *Nanodrucksensoren*

LOEWE III, *Mikro-Nano-Integration von Mikrobauteilen mit nanoskaligen Loten (MiNaLo)*

Arteos GmbH

PLEJADES GmbH

TYCO Electronics AMP GmbH

Karl und Marie Schack-Stiftung

TUD Forschungsschwerpunkt, *Nanomaterialien*

### **PD Dr. C.M. Thiele**

DFG,  *$\beta$ -Peptide als chirale Orientierungsmedien für die NMR-Spektroskopie*

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

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

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

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

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

DFG Excellence Cluster 259, *Smart Interfaces – understanding and designing fluid boundaries*

DFG-SFB TR75: *Tropfdynamische Prozesse unter extremen Umgebungsbedingungen*

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

DFG Exzellenz Akademie Materialwissenschaft und Werkstofftechnik, *Computational materials science – Grenzflächen und grenzflächendominierte Prozesse*

DFG, *Polymers at Interfaces in External Fields - From Fundamentals to Applications*

Research Grants Council Hong Kong, *Simulation and Experimental Studies of Electric Field-Induced Molecular Dipole Filaments Formation*



---

**Prof. Dr. H. Vogel**

BASF, *Quantifizierung der gegenseitigen Einflüsse von PTZ und Sauerstoff auf die Polymerisation von Acrylsäure und Acrylaten*

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

ANTACO/Hessen Agentur, *Kontinuierliche Technikumsanlage zur Herstellung von Biokohle aus Biomasse*

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

Evonik, *Grundlegende Untersuchungen zur Funktionsweise von Multikomponentenkatalysatoren in der Oxidation von Acrolein zu Acrylsäure*

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

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

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

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

Lonza, *Einsatz nachwachsender Rohstoffe zur Gewinnung von Grund- und Feinchemikalien sowie Verwendung von nah- und überkritischen Fluiden von Grund- und Feinchemikalien*

Max-Buchner-Forschungstiftung, *Reaktionstechnische Untersuchungen zur Ethylenherstellung aus wässrigen Ethanollösungen (Fermenterausträgen)*

UMICORE, *Kinetische Charakterisierung von Abgaskatalysatoren*

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

Wacker, *Umwandlung einer wässrigen 2,3-Butandiollösung unter superkritischen Bedingungen unter Anwendung von Katalysatoren in Methylethylketon*

---

## 21. Transfer von Forschungsleistungen in die Wirtschaft 2010

---

### 21.1. Bestehende Firmenausgründungen

**Prof. em. Dr. J. Brickmann**

MOLCAD GmbH, Darmstadt

**Prof. Dr. P. Friedl**

CytoTools GmbH, Darmstadt

DermaTool Biotech, Darmstadt

Cytopharma GmbH, Darmstadt

### 21.2. Dienstleistungen und Auftragsforschung

**Prof. Dr. M. Biesalski**

Messung mechanischer Eigenschaften von Spezialpapier

Auftragspapierherstellung

**Prof. Dr. G. Buntkowsky**

NMR-Messungen für verschiedene Industriepartner

**Prof. Dr. M. Busch**

Marktstudien für die Firma Evonic

**Prof. Dr. P. Claus**

Experimentelle Evaluierung einer Katalysatorbibliothek

Neuartiger solarmaterialbasierter Katalysator

**Prof. Dr. H. Kolmar**

Herstellung von optimierten Proteinen, Metabolic Explorer, Frankreich

**PD Dr. R. Meusinger**

NMR und IR Messungen

**Prof. Dr. F. Müller-Plathe**

Webseite für DFG Forschungsschwerpunkt 1199

**Prof. Dr. H. Plenio**

Messungen und Experimente für verschiedene Industriepartner

**Prof. Dr. J.J. Schneider**

Charakterisierung von Nanomaterialien

**Prof. Dr. H. Vogel**

Korrosionsuntersuchung, Fa. Alstom

Kinetische Simulation, Fa. Wacker