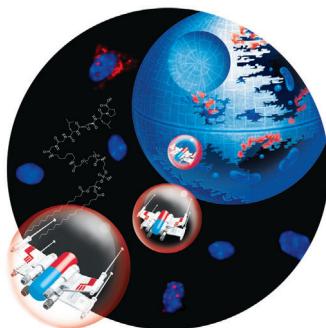
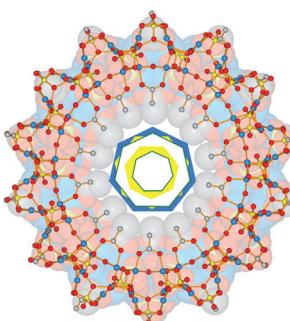


... (DELs) ist eine wichtige Methode zur Identifizierung von starken und spezifischen Protein-Liganden. In der Zuschrift auf S. 10220 ff. beschreiben Y. Huang, X. Li et al. eine neue DEL-Selektionsmethode, bei der Ligandbindung zur Bildung eines stabilen Komplexes führt, der gegen Nukleaseverdau (Pac-Man) resistent ist und somit angereichert wird. Solch iterative Selektionen sind mit unmodifizierten und nicht immobilisierten Zielmolekülen möglich.

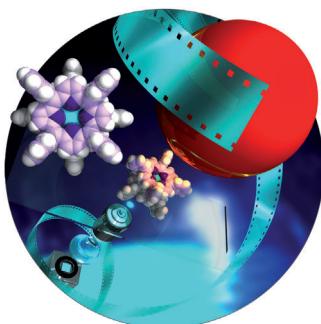
### Polyoxometallate

L. Cronin et al. untersuchen in der Zuschrift auf S. 10196 ff. die Selbstorganisation eines radförmigen  $\{Pd_{84}\}$ -Polyoxometallats durch Elektrophorese, Größenausschlusschromatographie und Massenspektrometrie. Die Bildung der Struktur aus  $\{Pd_6\}^-$ -Bausteinen konnte direkt verfolgt werden.



### Wirkstofftransport

In ihrer Zuschrift auf S. 10241 ff. berichten B. Turk, O. Vasiljeva et al. über einen lipidierten Cathepsin-B-Inhibitor, der in die Hülle von liposomalen Nanoträgern eingebaut wurde.



### Synthetische molekulare Maschinen

Die schrittweise intramolekulare Rotation eines Doppeldecker-Porphyrins wurde mit einer relativ großen Kugelchen-Sonde durch optische Mikroskopie visualisiert. H. Noji et al. beschreiben das Experiment in der Zuschrift auf S. 10246 ff.

### So erreichen Sie uns:

#### Redaktion:

E-Mail: [angewandte@wiley-vch.de](mailto:angewandte@wiley-vch.de)

Telefax: (+49) 62 01–606-331

Telefon: (+49) 62 01–606-315

#### Sonderdrucke, PDFs, Poster, Kalender:

Carmen Leitner

E-Mail: [chem-reprints@wiley-vch.de](mailto:chem-reprints@wiley-vch.de)

Telefax: (+49) 62 01–606-331

Telefon: (+49) 62 01–606-327

#### Rechte und Lizenzen:

Bettina Loycke

E-Mail: [rights-and-licences@wiley-vch.de](mailto:rights-and-licences@wiley-vch.de)

Telefax: (+49) 62 01–606-332

Telefon: (+49) 62 01–606-280

#### Online Open:

Margitta Schmitt, Carmen Leitner

E-Mail: [angewandte@wiley-vch.de](mailto:angewandte@wiley-vch.de)

Telefax: (+49) 62 01–606-331

Telefon: (+49) 62 01–606-315

#### Abonnements:

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

Telefax: (+49) 62 01–606-184

Telefon: 0800 1800536

(innerhalb Deutschlands)

+44(0) 1865476721

(außerhalb Deutschlands)

#### Anzeigen:

Marion Schulz

E-Mail: [mschulz@wiley-vch.de](mailto:mschulz@wiley-vch.de)

[jpiess@wiley-vch.de](mailto:jpiess@wiley-vch.de)

Telefax: (+49) 62 01–606-550

Telefon: (+49) 62 01–606-565

#### Kurierdienste:

Boschstraße 12, 69469 Weinheim

#### Postanschrift:

Postfach 101161, 69451 Weinheim

Die *Angewandte Chemie* ist eine Zeitschrift der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh), der größten chemiewissenschaftlichen Fachgesellschaft in Kontinental-europa. Informationen zu den vielfältigen Aktivitäten und Leistungen der GDCh, z. B. dem verbilligten Bezug der *Angewandten Chemie*, sowie den Antrag auf Mitgliedschaft finden Sie unter [www.gdch.de](http://www.gdch.de) oder können Sie bei der GDCh, Postfach 900440, D-60444 Frankfurt am Main, anfordern.



GESELLSCHAFT  
DEUTSCHER CHEMIKER

## Laden Sie die **Angewandte App**

Eine Zeitschrift der Gesellschaft Deutscher Chemiker



Erhältlich im  
**App Store**

**Stöbern und lesen Sie in der *Angewandten* mit neuer Leichtigkeit auf dem iPad oder iPhone**

- Bleiben Sie auf dem Laufenden mit den neuesten Early-View-Artikeln.
- Laden Sie jede Woche das neue Heft automatisch, sobald es erscheint.
- Lesen Sie neue oder gespeicherte Artikel jederzeit und überall.



## Service

Top-Beiträge der Schwesternzeitschriften der *Angewandten*

**10142 – 10145**

## Autoren-Profile



„Mein Lieblingsspruch ist: Alle Wege führen nach Rom (aber oft nicht der, von dem man es erwartet).  
Meine größte Motivation ist Terra Incognita zu finden. ...“  
Dies und mehr von und über Ingo Krossing finden Sie auf Seite 10146 – 10147.

Ingo Krossing \_\_\_\_\_ **10146 – 10147**



W. Kaim



E. F. Aziz



P. Levkin



M. Driess

## Nachrichten

Alfred-Stock-Gedächtnispreis:

W. Kaim \_\_\_\_\_ **10148**

Nernst-Haber-Bodenstein-Preis:

Emad F. Aziz \_\_\_\_\_ **10148**

Ewald-Wicke-Preis:

P. Levkin \_\_\_\_\_ **10148**

In die Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften gewählt:

M. Driess \_\_\_\_\_ **10148**

## Bücher

Symmetry of Crystals & Molecules

Mark Ladd

rezensiert von W. Kaminsky \_\_\_\_\_ **10149**

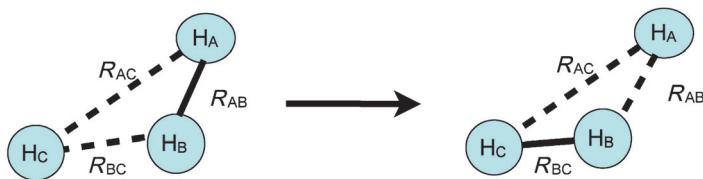
## Aufsätze

### Molecular Modeling

M. Karplus\* 10152–10166



Entwicklung von Multiskalenmodellen für komplexe chemische Systeme: Von H + H<sub>2</sub> zu Biomolekülen (Nobel-Aufsatz)



Obwohl die Bewegung von Atomen den Gesetzen der Quantenmechanik unterliegt, war die Erkenntnis, dass eine klassisch mechanische Beschreibung atomarer Bewegung in den meisten Fällen ausreicht, der Schlüssel zur Simulation der

Dynamik komplexer Systeme, einschließlich Biomolekülen. Die Grundlagen hierfür legte M. Karplus bereits in den 1960er Jahren mit Rechnungen der symmetrischen Austauschreaktion H + H<sub>2</sub> → H<sub>2</sub> + H.

### Molecular Modeling

M. Levitt\* 10168–10181



Geburt und Zukunft der Multiskalenmodellierung von makromolekularen Systemen (Nobel-Aufsatz)

Die Computerindustrie hätte nach Michael Levitt einen Teil des Nobelpreises für Chemie 2013 verdient, denn ihre Forschungs- und Entwicklungsleistung hatte zu drastisch höheren Rechengeschwindigkeiten geführt (siehe Tabelle). Darum sind die Kosten einer einzelnen Rechnung heute 100 000 000-mal geringer als zu Beginn von Levitts wissenschaftlicher Karriere, wie er in seinem sehr persönlichen Bericht anlässlich der Verleihung des Nobelpreises betonte.

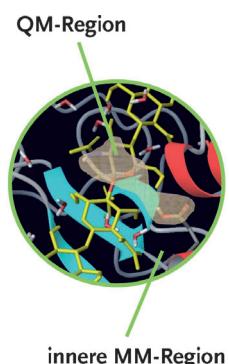
Jahr	Kosten	Geschwindigkeit	Speicher	Größe
1967	\$40×10 <sup>6</sup>	0.1 MHz	1 MB	HALLE
2013	\$4000	1 GHz	10 GB	LAPTOP
Veränderung	10000	10000	10000	10000

### Molecular Modeling

A. Warshel\* 10182–10194

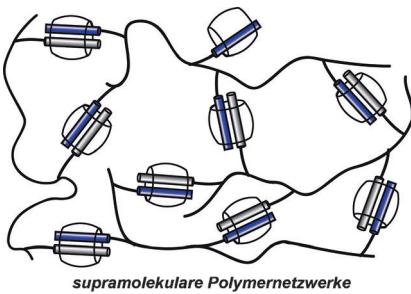
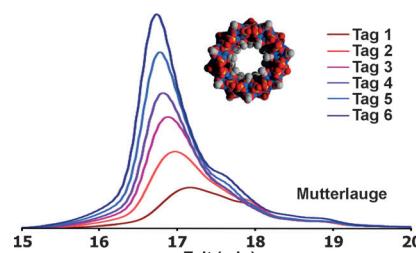
Multiskalenmodellierung biologischer Funktionen: Von Enzymen zu molekularen Maschinen (Nobel-Aufsatz)

Ein detailliertes Verständnis der Wirkungsweise biologischer Moleküle ist eine Voraussetzung für Fortschritte in der Medizin, allerdings ist es praktisch unmöglich, eine vollständige quantenmechanische Beschreibung großer molekularer Systeme zu verwenden. Die Lösung für dieses Problem ist die Aufteilung großer Systeme in einen quantenmechanischen und einen durch empirische Kraftfelder beschreibbaren Teil.

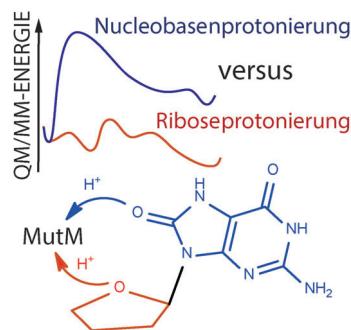


## Zuschriften

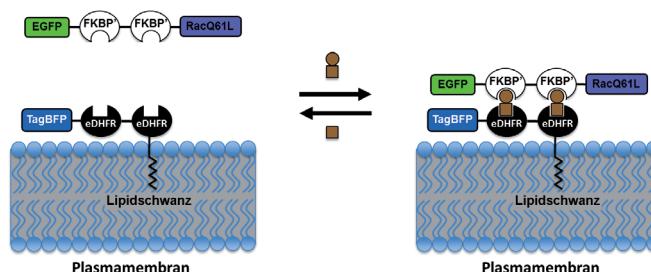
**Sehen, wie das Rad sich dreht:** Die Selbstorganisation eines molekularen  $\{Pd_{84}\}$ -Rades wurde durch Elektrophorese und Größenausschlusschromatographie untersucht (siehe Bild). In Verbindung mit Elektrospray-Massenspektrometrie konnte seine Bildung im Verlauf von 6 Tagen durch die Aggregation von  $\{Pd_6\}^-$ -Bausteinen direkt verfolgt werden.



**Supramolekulare Hydrogele** wurden durch Nutzung der Wirt-Gast-Wechselwirkungen des Makrozyklus Cucurbit[8]-uril (CB[8]) mit verschiedenen Gastmolekülen erzeugt. Die mechanische Stärke dieser Materialien korreliert direkt mit der Energiebarriere für die Dissoziation der ternären CB[8]-Komplexe, während für die Selbstheilung eine niedrige Energiebarriere der Assoziationsbildung notwendig ist.



**Zucker ist das Ziel:** QM/MM-Rechnungen mit mehr als 1000 QM-Atomen zur Beschreibung der katalytischen Tasche entschlüsseln den Basenexzisionsmechanismus der bakteriellen Glycosylase MutM. Entgegen bisheriger Annahmen greift MutM zuerst den Ribosering an. Aktivitätsassays und eine neue Kristallstruktur des MutM-Läsionskomplexes belegen diesen Reparaturprozess, der sich durch eine stärkere Beteiligung des Zuckerringes auszeichnet.



**Per Anhalter:** Ein neuartiges bioorthogonales und reversibles chemisch induziertes Dimerisierungssystem wurde entwickelt. Die Translokation eines konstitu-

tiv aktiven Rac1 zur Plasmamembran führte zur raschen und reversiblen Bildung von Lamellipodien in lebenden Zellen.

## Polyoxometallate

R. A. Scullion, A. J. Surman, F. Xu, J. S. Mathieson, D.-L. Long, F. Haso, T. Liu, L. Cronin\* **10196 – 10201**

Exploring the Symmetry, Structure, and Self-Assembly Mechanism of a Gigantic Seven-Fold Symmetric  $\{Pd_{84}\}$  Wheel

## Frontispiz



## Wirt-Gast-Systeme

E. A. Appel, R. A. Forster, A. Koutsoubas, C. Toprakcioglu, O. A. Scherman **10202 – 10207**

Activation Energies Control the Macroscopic Properties of Physically Cross-Linked Materials



## DNA-Reparatur

K. Sadeghian, D. Flraig, I. D. Blank, S. Schneider, R. Strasser, D. Stathis, M. Winnacker, T. Carell,\* C. Ochsfeld\* **10208 – 10212**

Ribose-Protonated DNA Base Excision Repair: A Combined Theoretical and Experimental Study



## Reversible Dimerisierung

P. Liu, A. Calderon, G. Konstantinidis, J. Hou, S. Voss, X. Chen, F. Li, S. Banerjee, J. Hoffmann, C. Theiss, L. Dehmelt, Y. Wu\* **10213 – 10219**

A Bioorthogonal Small-Molecule-Switch System for Controlling Protein Function in Live Cells





### DNA-kodierte Bibliotheken

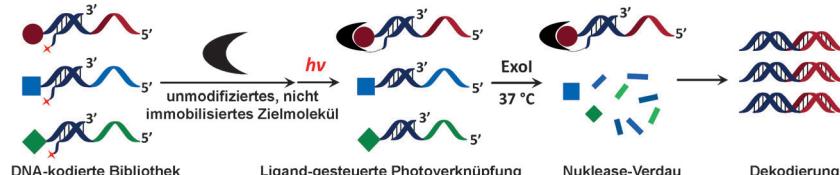
P. Zhao, Z. Chen, Y. Li, D. Sun, Y. Gao,  
Y. Huang,\* X. Li\* — 10220–10223



Selection of DNA-Encoded Small Molecule Libraries Against Unmodified and Non-Immobilized Protein Targets



### Titelbild



**Die Notwendigkeit** für modifizierte und immobilisierte Zielmoleküle ist noch immer ein erheblicher Nachteil bei der Selektion DNA-kodierter Bibliotheken gegen biologische Zielmoleküle. Durch den Schutz von Endpositionen und

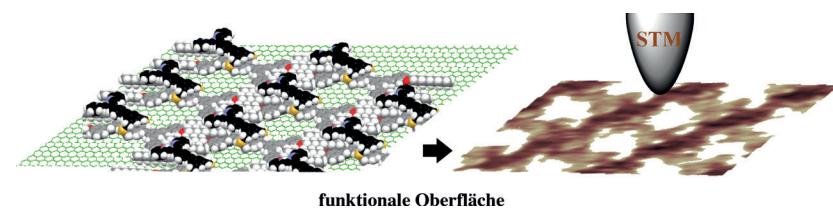
Ligand-induzierte Photoverknüpfung des Targets werden nun iterative Selektionen DNA-kodierter Bibliotheken mit unmodifizierten und nicht immobilisierten Zielproteinen möglich.

### Selbstorganisation

P. Du, M. Jaouen, A. Bocheux,  
C. Bourgogne, Z. Han, V. Bouchiat,  
D. Kreher, F. Mathevret,  
C. Fiorini-Debuisschert, F. Charra,\*  
A. J. Attias\* — 10224–10230



Surface-Confining Self-Assembled Janus Tectons: A Versatile Platform towards the Noncovalent Functionalization of Graphene



funktionale Oberfläche

**Ordnlich aufgereiht:** Eine Bibliothek von Janustektonen mit kleinen chemischen Gruppen oder funktionalen Einheiten wurde synthetisiert. Die Selbstorganisation auf sp<sup>2</sup>-hybridisiertem Kohlenstoff führt gemäß STM zur Bildung organisier-

ter adsorbiertener Lagen mit den gleichen Gitterparametern. Die exponierte äußere Oberfläche bietet vielfältige Funktionalitäten, die mit präziser lateraler Ordnung positioniert sind.

### Modifizierte Peptide

V. Mäde, S. Babilon, N. Jolly, L. Wanka,  
K. Bellmann-Sickert, L. E. Diaz Gimenez,  
K. Mörl, H. M. Cox, V. V. Gurevich,  
A. G. Beck-Sickinger\* — 10231–10235



Peptide Modifications Differentially Alter G Protein-Coupled Receptor Internalization and Signaling Bias



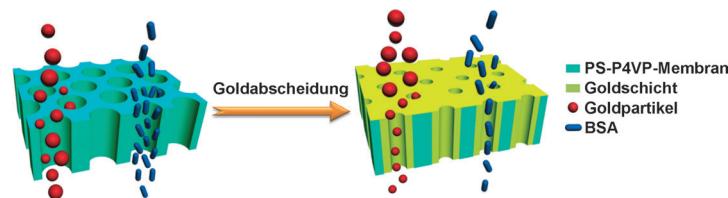
**Klare Vorlieben:** PEGylierung und Lipidierung verstärken die Präferenz von Liganden für anorexigene G-Protein-gekoppelte humane Y-Rezeptoren. Die Lipidierung erhöht die Neigung des Agonisten hin zur Arrestinrekrutierung und Internalisierung, während die PEGylierung eine Internalisierung des Rezeptors verhindert und die Signalgebung unabhängig vom Zellsystem und dem modifizierten Rest verlängert; dies spricht für eine neuartige Wirkweise.

### Blockcopolymer-Membran

H. Z. Yu, X. Y. Qiu, S. P. Nunes,  
K. V. Peinemann\* — 10236–10240

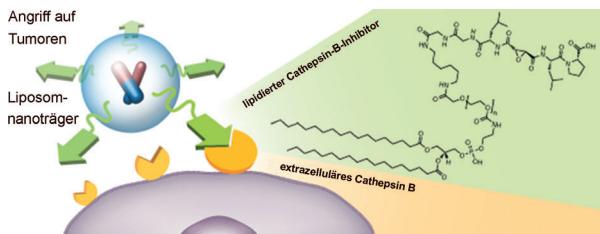


Self-Assembled Isoporous Block Copolymer Membranes with Tuned Pore Sizes



**Goldporen:** Membranen mit einstellbarem Poredurchmesser zwischen 3 und 20 nm wurden hergestellt und für Nanopartikel trennungen und den kontrollierten Proteintransport getestet. Die Porengröße konnte dabei durch die stromlose

Abscheidung von Gold gesteuert werden. Die präzise Größenselektivität, einfache Herstellung und Biokompatibilität legen Anwendungen in der Aufreinigung von Nanomaterialien und im Wirkstofftransport nahe.



**Zielgenau:** Ein lipidierter Cathepsin-B-(CtsB)-Inhibitor wurde in einen liposomalen Nanoträger eingebaut, um CtsB-bindende Wirkstofftransportsysteme zu erhalten, die mit diagnostischen oder therapeutischen Stoffen beladen werden

können. Die Liposome wurden selektiv von Tumor und Bindegewebszellen aufgenommen, sodass die Zielführung auf CtsB einen vielversprechenden Ansatz für Krebsdiagnose und -therapie darstellt.

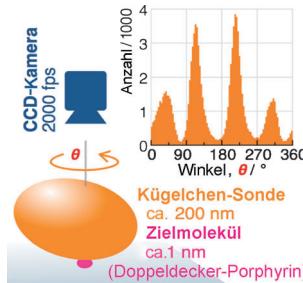
## Wirkstofftransport

G. Mikhaylov, D. Kliment, N. Schaschke,  
U. Mikac, M. Vizovisek, M. Fonovic,  
V. Turk, B. Turk,\*  
O. Vasiljeva\* — **10241 – 10245**

Selective Targeting of Tumor and Stromal Cells By a Nanocarrier System Displaying Lipidated Cathepsin B Inhibitor

## Innen-Rücktitelbild

**Optische Einzelmolekülmikroskopie** wurde verwendet, um die Rotation eines Doppeldecker-Porphyrins zu untersuchen. Mit einem magnetischen Kugelchen als Sonde konnte die Drehdiffusion dieses Nanorotors in 90°-Schritten visualisiert werden; sie ist im Einklang mit der Vierfachsymmetrie des Moleküls.

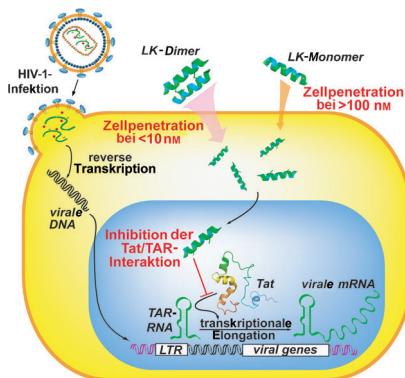


## Synthetische molekulare Maschinen

T. Ikeda, T. Tsukahara, R. Iino,  
M. Takeuchi, H. Noji\* — **10246 – 10249**

Motion Capture and Manipulation of a Single Synthetic Molecular Rotor by Optical Microscopy

## Rücktitelbild

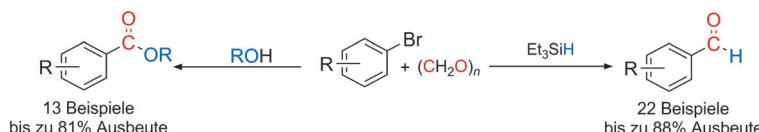


**Wenn schon in die Zelle, dann besser zu zweit:** Eine fast quantitative Aufnahme in eukaryotische Zellen und eine effektive Hemmung der Elongation des kurzen Haarnadel-RNA-Transkripts TAR bei niedrigen nanomolaren Konzentrationen gelang mit dimeren  $\alpha$ -helicalen Peptidbündeln auf Basis von Leucin (L) und Lysin (K). Die wirksame Inhibition der HIV-1-Replikation spricht für das große Potenzial dieser Dimere als Anti-HIV-1-Wirkstoffe.

## Antivirale Peptide

S. Jang, S. Hyun, S. Kim, S. Lee, I.-S. Lee,  
M. Baba, Y. Lee,\* J. Yu\* — **10250 – 10253**

Cell-Penetrating, Dimeric  $\alpha$ -Helical Peptides: Nanomolar Inhibitors of HIV-1 Transcription



**Aussortieren von CO:** Neuartige Syntheseprotokolle für Palladium-katalisierte reduktive Carbonylierungen und Alkoxykarbonylierungen von Arylbromiden

mit Paraformaldehyd als externe CO-Quelle wurden entwickelt. Der Vorteil: Auf die Verwendung von Kohlenmonoxidgas kann verzichtet werden.

## Carbonylierungen

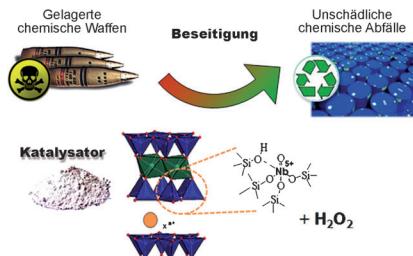
K. Natte, A. Dumrath, H. Neumann,  
M. Beller\* — **10254 – 10258**

Palladium-Catalyzed Carbonylations of Aryl Bromides using Paraformaldehyde: Synthesis of Aldehydes and Esters

## Heterogene Katalyse

F. Carniato, C. Bisio,\* R. Psaro,  
L. Marchese,  
M. Guidotti\* — **10259 – 10262**

 Niobium(V) Saponite Clay for the Catalytic Oxidative Abatement of Chemical Warfare Agents



**Heterogene Katalyse gegen chemische Waffen:** Ein bifunktionales Nb<sup>V</sup>-haltiges Saponit-Tonmineral wurde hergestellt und als Katalysator für die oxidative Beseitigung chemischer Kampfstoffe verwendet. Im Vergleich zum Ausgangsmaterial und einem herkömmlichen Dekontaminationspulver wurde eine erstaunliche Aktivität und hohe Selektivität für die Oxidation von (2-Chlorethyl)ethylsulfid, einem Simulans für Senfgas, bei Raumtemperatur gefunden.

## Li-S-Batterien

J. L. Wang,\* F. J. Lin, H. Jia, J. Yang,  
C. W. Monroe, Y. N. NuLi — **10263 – 10268**

 Towards a Safe Lithium–Sulfur Battery with a Flame-Inhibiting Electrolyte and a Sulfur-Based Composite Cathode

**Feuertaufe:** Eine nichtentzündbare Schwefelkompositkathode zeigt eine stabile elektrochemische Aktivität über 750 Zyklen und eine Entladungskapazität von über  $800 \text{ mAh}^{-1} \text{ g}^{-1}$  (Schwefel) mit einer Entladerate von 10 C in einem feuersicheren Elektrolyten. Der Elektrolyt wurde aus einem Phosphitadditiv erzeugt, das an Grenzflächenreaktionen an der Kathode teilnimmt und die Lithiumionendiffusion um das mehr als Zehnfache beschleunigt.



nichtentzündbare Kathode



feuersicherer Elektrolyt

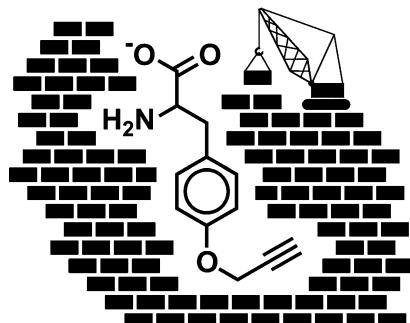


## Biosynthetisches Engineering

H. Kries, R. Wachtel, A. Pabst, B. Wanner,  
D. Niquille, D. Hilvert\* — **10269 – 10272**

 Reprogramming Nonribosomal Peptide Synthetases for „Clickable“ Amino Acids

**In der Tasche:** Eine einzige Mutation in der aktiven Tasche kann die Substratspezifität einer nichtribosomalen Peptidsynthetase umprogrammieren und ermöglicht dadurch den effizienten Einbau nichtnatürlicher, aromatischer Aminosäuren mit funktionellen Gruppen für die bioorthogonale Markierung.

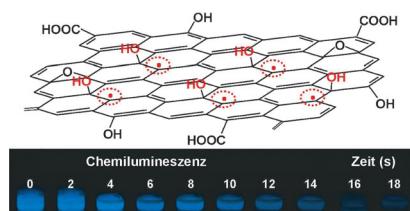


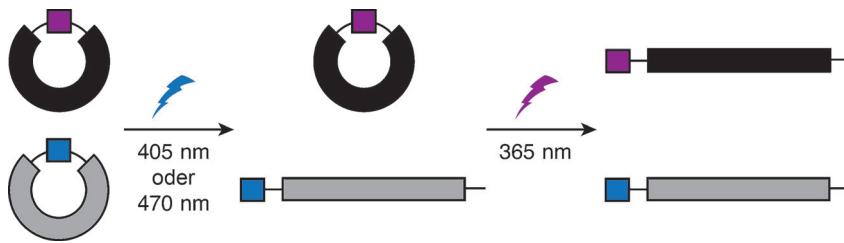
## Graphenoxid-Radikale

L. Yang, R. Zhang, B. Liu, J. Wang,  
S. Wang, M. Han,  
Z. Zhang\* — **10273 – 10277**

 π-Conjugated Carbon Radicals at Graphene Oxide to Initiate Ultrastrong Chemiluminescence

**GO-Chemilumineszenz:** Frisch hergestelltes Graphenoxid enthält eine hohe Zahl von Kohlenstoffradikalen in seiner  $\pi$ -Ebene. Diese Radikale resultieren aus der Addition von Hydroxylradikalen aus Wasserstoffperoxid an die konjugierten Doppelbindungen des Graphenoxids und können die langandauernde, sichtbare Lumineszenz von Luminol auslösen.





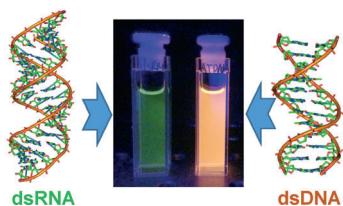
**Nicht auf gleicher Wellenlänge:** Die sequenzielle Stummschaltung von Genen in Zebrafischembryos gelingt mithilfe von photoaktivierbaren Morpholino-oligonukleotiden, die auf Licht verschiedener Wellenlängen ansprechen (siehe Bild).

Diese optochemischen Hilfsmittel ermöglichen die Untersuchung genetischer Wechselwirkungen, die die Entstehung von Mesodermmustern dynamisch steuern.

## Optochemische Biologie

S. Yamazoe, Q. Liu, L. E. McQuade,  
A. Deiters,\* J. K. Chen\* — **10278–10282**

Sequential Gene Silencing Using Wavelength-Selective Caged Morpholino Oligonucleotides



**Komplexe Therapie:** Der lumineszierende Pt<sup>II</sup>-Pinzettengkomplex [Pt(C<sup>4</sup>N<sup>3</sup>N)(C≡NtBu)]ClO<sub>4</sub> interkaliert in DNA und bildet einen ungewöhnlichen emissiven Exciplex. Das Emissionsprofil und die Lebensdauer des angeregten Zustands hängen von der Nucleinsäurestruktur ab, was zur Differenzierung zwischen dsRNA und dsDNA genutzt wird. Der Komplex zeigt starke Cytotoxizität in vitro und unterdrückt das Tumorwachstum in einem Tiermodell.

## Platin-DNA-Intercalatoren

T. Zou, J. Liu, C. T. Lum, C. Ma,  
R. C.-T. Chan, C.-N. Lok, W.-M. Kwok,  
C.-M. Che\* — **10283–10287**

Luminescent Cyclometalated Platinum(II) Complex Forms Emissive Intercalating Adducts with Double-Stranded DNA and RNA: Differential Emissions and Anticancer Activities



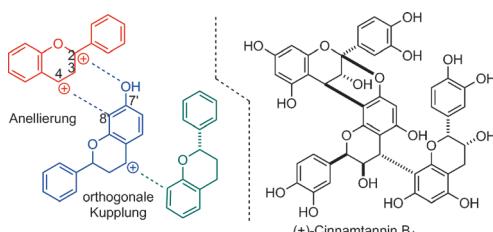
**Die Kartierung** von Pyrrol/Imidazolpolyamiden über mehrere Genloki mit ausgeprägten Chromatineigenschaften in lebenden Zellen wird erstmals beschrieben. Eine bioinformatische Analyse zeigt, dass geclusterte Bindungsstellen die Bin-

dung in Zellen am besten wiedergeben. Hierdurch bietet sich eine neue Methode für die Verwendung von Polyamiden und vielleicht auch anderen synthetischen Molekülen zur effektiven Identifizierung spezifischer Stellen im Genom.

## Chemische Genomik

G. S. Erwin, D. Bhimsaria, A. Eguchi,  
A. Z. Ansari\* — **10288–10292**

Mapping Polyamide–DNA Interactions in Human Cells Reveals a New Design Strategy for Effective Targeting of Genomic Sites



**Süße Oligocatechine:** Die erste stereoselektive Synthese von doppelt verbrückten Procyanidinen, (+)-Procyanidin A<sub>2</sub> und (+)-Cinnamtannin B<sub>1</sub>, gelang durch dop-

pelte Aktivierung der elektrophilen Flavaneinheiten an C2 und C4. Die Catechin-Anellierung verläuft mit hoher Ausbeute und Regioselektivität.

## Naturstoffe

Y. Ito, K. Ohmori,\*  
K. Suzuki\* — **10293–10297**

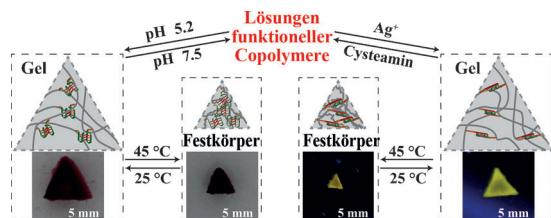
Annulation Approach to Doubly Linked (A-type) Oligocatechins: Syntheses of (+)-Procyanidin A<sub>2</sub> and (+)-Cinnamtannin B<sub>1</sub>



## Temperatursensitive Polymere

W. Guo, C. H. Lu, X. J. Qi, R. Orbach,  
M. Fadeev, H. H. Yang,  
I. Willner\* **10298 – 10302**

Switchable Bifunctional Stimuli-Triggered Poly-*N*-Isopropylacrylamide/DNA Hydrogels



**Alles ändert sich:** Nukleinsäure-funktionalisierte pNIPAM-Copolymere vollziehen in Gegenwart von  $\text{H}^+$ / $\text{OH}^-$  oder  $\text{Ag}^+$ /Cysteamin zyklische und reversible Gel-

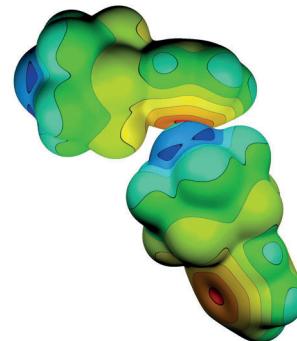
Lösungs-Phasenübergänge. Beim Erwärmen und Abkühlen führen die Hydrogels außerdem zyklische und reversible Hydrogel-Festkörper-Übergänge aus.

## Chalkogenbindungen

J. Fanfrlík, A. Přáda, Z. Padělková,  
A. Pecina, J. Macháček, M. Lepšík,  
J. Holub, A. Růžička,\* D. Hnyk,\*  
P. Hobza\* **10303 – 10306**

The Dominant Role of Chalcogen Bonding in the Crystal Packing of 2D/3D Aromatics

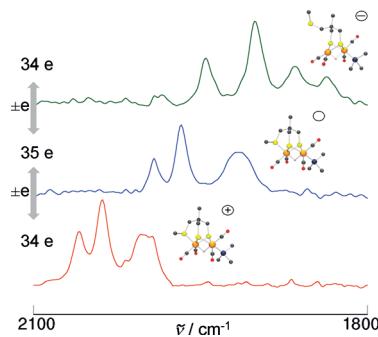
**Chalkogenbindungen** in Thiaboranen erweisen sich als deutlich stärker als  $\sigma$ -Loch-Wechselwirkungen in organischen Verbindungen. Der Grund ist der stark positive Gürtel aus  $\sigma$ -Löchern am positiv geladenen Schwefelatom. Die Ladungsverteilung ist die treibende Kraft für die Bildung von Chalkogenbindungen von Thiaboranen.



## Elektrochemie

A. Jablonskytė, J. A. Wright, S. A. Fairhurst,  
L. R. Webster,  
C. J. Pickett\* **10307 – 10310**

[FeFe] Hydrogenase: Protonation of {2Fe3S} Systems and Formation of Super-reduced Hydride States

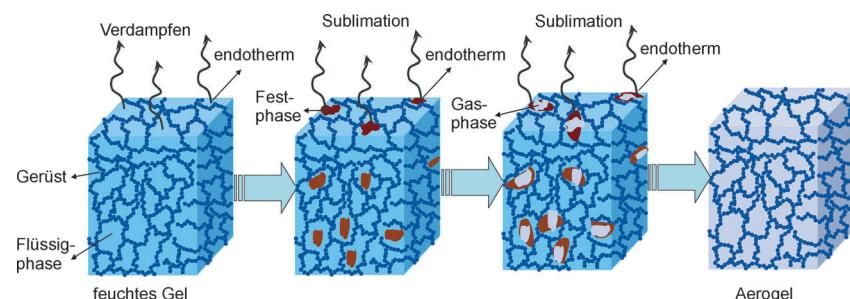


**Dünngesät:** Die Synthese und kristallographische Charakterisierung eines Komplexes mit definiertem  $\{\text{2Fe3S}(\mu\text{-H})\}$ -Kern führt unter Beibehaltung der Kerngeometrie zu einem paramagnetischen verbrückten Hydrid. Das chemische Verhalten dieser 35-Elektronen-Spezies im beschränkten Raum einer spektroelektrochemischen FTIR-Dünnenschichtzelle liefert den Nachweis eines beispiellosen hoch reduzierten  $\text{Fe}(\mu\text{-H})\text{Fe}^{\text{l}}$ -Intermediats (siehe Schema).

## Aerogele

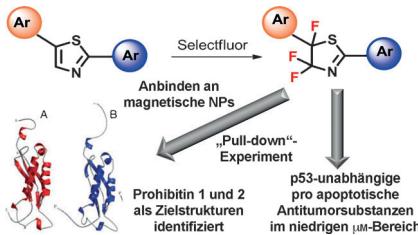
L. Ren,\* S. Cui, F. Cao,  
Q. Guo **10311 – 10313**

An Easy Way To Prepare Monolithic Inorganic Oxide Aerogels



**Ohne Rissbildung:** Ein Trocknungsverfahren durch Sublimation eines organischen Lösungsmittels ermöglicht die zügige Herstellung rissfreier monolithischer Aerogele aus anorganischen Oxiden aus

feuchten Gelen. Auf das endotherme Verdampfen des organischen Lösungsmittels von der äußeren Oberfläche folgt dabei die Sublimation von verfestigtem Lösungsmittel (siehe Bild).



**Dreifach fluoriert:** Eine neuartige Fluorierung wandelt Thiazole selektiv in trifluorierte Heterocyclen um. Robuste Reaktionen führen über kurze Sequenzen zu einer Familie wirksamer p53-unabhängiger proapoptotischer Antitumorsubstanzen. Pull-down-Experimenten zufolge sind diese Derivate selektive Prohibitin-Liganden. NP = Nanopartikel.

## Wirkstoffentwicklung

- A. Pérez-Perarnau, S. Preciado,  
C. M. Palmeri, C. Moncunill-Massaguer,  
D. Iglesias-Serret,  
D. M. González-Gironès, M. Miguel,  
S. Karasawa, S. Sakamoto, A. M. Cosialls,  
C. Rubio-Patiño, J. Saura-Esteller,  
R. Ramón, L. Caja, I. Fabregat, G. Pons,  
H. Handa, F. Albericio,\* J. Gil,\*  
R. Lavilla\* **10314 – 10318**



A Trifluorinated Thiazoline Scaffold  
Leading to Pro-apoptotic Agents Targeting  
Prohibitins



**Vollständig funktionalisierte 1,2,3-Triazole** wurden durch eine metallfreie Dreikomponenten-Reaktion erhalten. Leicht zugängliche Ausgangsmaterialien wurden in dieser organokatalytischen Reaktion

eingesetzt, die die gewünschten Produkte in guter Ausbeute und mit hoher Regioselektivität lieferte. Die meisten der synthetisierten Triazole waren bislang nicht zugänglich.

## Triazolsynthese

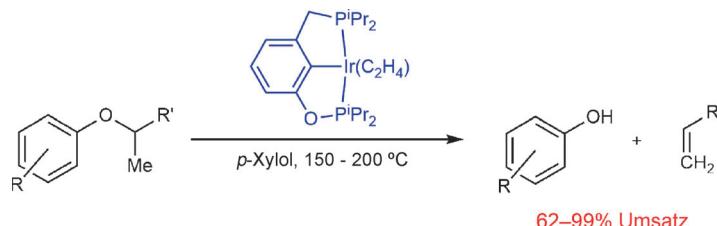
- J. Thomas, J. John, N. Parekh,  
W. Dehaen\* **10319 – 10323**



A Metal-Free Three-Component Reaction  
for the Regioselective Synthesis of 1,4,5-Trisubstituted 1,2,3-Triazoles



## Innentitelbild



**Dehydroaryloxylierungen fest im Griff:** Die Spaltung der Alkyl-C–O-Bindung von Arylethern ohne zusätzliche Reagentien wird durch Iridium-Pincerkomplexe kата-

lysiert. In teilweise nur einstündigen Reaktionen werden Umsätze von bis zu 99% zu den entsprechenden Phenolen erzielt.

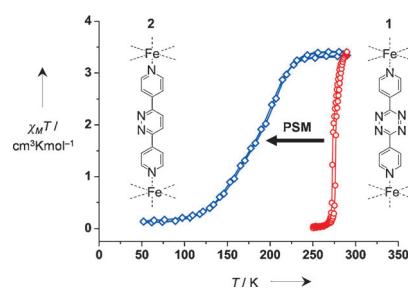
## C–O-Bindungsspaltung

- M. C. Haibach, N. Lease,  
A. S. Goldman\* **10324 – 10327**



Catalytic Cleavage of Ether C–O Bonds by Pincer Iridium Complexes

**Umschaltspiel:** Die kovalente Modifikation (PSM; siehe Bild) eines säulenartigen Liganden in einem porösen Fe<sup>II</sup>-Spin-Crossover-Gerüst liefert ein verwandtes Gerüst mit einem anderen Schaltverhalten und erfolgt unter Erhaltung der Einkristallinität. Die Studie etabliert die kovalente Modifikation als neue Methode zur Steuerung des Spin-Crossovers in dieser Klasse von porösen multifunktionellen Materialien.



## Metall-organische Gerüste

- J. E. Clements, J. R. Price, S. M. Neville,  
C. J. Kept\* **10328 – 10332**

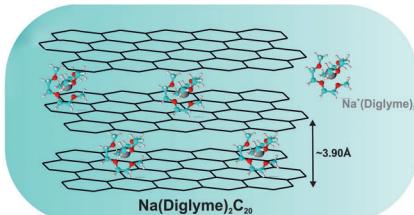


Perturbation of Spin Crossover Behavior by Covalent Post-Synthetic Modification of a Porous Metal–Organic Framework

## Batterien

B. Jache, P. Adelhelm\* — 10333–10337

- Use of Graphite as a Highly Reversible Electrode with Superior Cycle Life for Sodium-Ion Batteries by Making Use of Co-Intercalation Phenomena



## Entgegen der allgemeinen Auffassung

kann man Graphit als Elektrodenmaterial in Natriumionenbatterien verwenden, indem man die Bildung ternärer Graphit-Interkalationsverbindungen nutzt. Die wichtigen Merkmale dieser Elektrodenreaktion sind eine geringe irreversible Kapazität, niedrige Überspannungen und verbesserte Zyklisierbarkeit. Mit einer Kapazität nahe  $100 \text{ mAh g}^{-1}$  ist die Elektrode vielversprechend für stationäre Anwendungen.

## Trifluorethylierung

H. Zhang, P. Chen,  
G. Liu\* — 10338–10342

- Palladium-Catalyzed Cascade C–H Trifluoroethylation of Aryl Iodides and Heck Reaction: Efficient Synthesis of *ortho*-Trifluoroethylstyrenes



### C–H-Trifluorethylierung, 37 Beispiele

Die Palladium-katalysierte selektive C–H-Trifluorethylierung von Aryliodiden ermöglicht die effiziente Synthese einer Vielzahl an *ortho*-Trifluoroethyl-substituierten Styrolen. Mechanistische Studien

zeigen, dass die Reaktion über eine geschwindigkeitsbestimmende oxidative Addition von  $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{I}$  an einen Palladacyclus verläuft.

## Aktive Zentren in Sn- $\beta$

P. Wolf, M. Valla, A. J. Rossini,  
A. Comas-Vives, F. Núñez-Zarur,  
B. Malaman, A. Lesage, L. Emsley,  
C. Copéret,\* I. Hermans\* — 10343–10347

- NMR Signatures of the Active Sites in Sn- $\beta$  Zeolite

**Offen und geschlossen:** Die  $^{119}\text{Sn}$ -Mößbauer- und DNP-SENS-NMR-spektroskopischen Signaturen von Sn- $\beta$ -Zeolith deuten gemeinsam mit Dichtefunktionalrechnungen an einem Modell eines T-Zentrums darauf hin, dass es sich bei den aktiven Zentren um zwei oktaedrisch koordinierte  $\text{Sn}^{\text{IV}}$ -Zentren handelt. Bei einem sind zwei Wassermoleküle an das Sn-Gerüstatom gebunden (geschlossenes Zentrum), bei dem anderen wurde eine der Sn-O-Si-Bindungen durch ein Wassermolekül gespalten (offenes Zentrum).



## Enzymmodelle

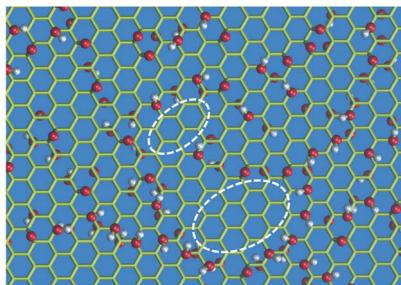
S. K. Chatterjee, R. C. Maji, S. K. Barman,  
M. M. Olmstead,  
A. K. Patra\* — 10348–10353

- Hexacoordinate Nickel(II)/(III) Complexes that Mimic the Catalytic Cycle of Nickel Superoxide Dismutase



**Copy-Cat:** Sechsachsig koordinierte Nickel(II)/(III)-Komplexe wurden hergestellt, die den Katalysezyklus der Superoxid-Dismutase (NiSOD) durch einen Außenschalen-Elektronentransfermechanismus nachahmen. Die Komplexe ent-

halten einen doppelt dreizähnigen  $\text{N}_2\text{S}$ -Donorcarboxamidliganden, *N*-2-Phenylthiophenyl-2'-pyridincarboxamid ( $\text{HL}^{\text{Ph}}$ ), und wurden auf ihre Strukturen und SOD-Aktivitäten untersucht.

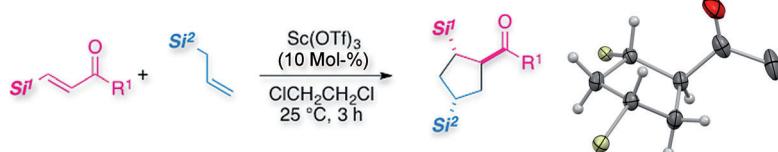


**Ein Reaktionsmechanismus** und ein kinetisches Profil für die Oxidation von Graphen werden vorgeschlagen. Die Oxidation läuft unter hoher Korrelation zwischen den Oxidationszentren ab und umfasst drei entscheidende Faktoren: 1) die Spaltung von delokalisierten  $\pi$ -Bindungen, 2) sterische Hinderung und 3) Wasserstoffbrückenbildung.

## Graphenoxid

J.-R. Yang, G.-S. Shi,\* Y.-S. Tu,\*  
H.-P. Fang \_\_\_\_\_ **10354 – 10358**

High Correlation between Oxidation Loci on Graphene Oxide



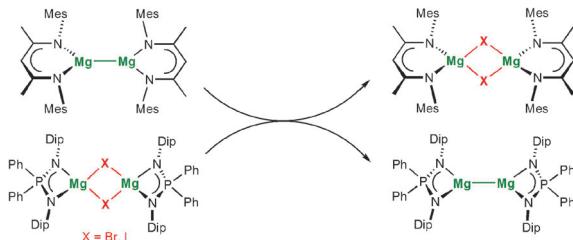
**Elektronische Effekte beider Silylgruppen** sind in der Titelreaktion entscheidend für die selektive Cycloaddition unter Verschiebung einer Silylgruppe. Die Silyl-

gruppen des Cycloaddukts können durch Oxidation regioselektiv in Hydroxygruppen umgewandelt werden. Röntgenstruktur: C grau, H weiß, Si gelb, O rot.

## Synthesemethoden

K. Okamoto,\* E. Tamura,  
K. Ohe\* \_\_\_\_\_ **10359 – 10363**

Stereoselective Construction of 1,3-Disilylcyclopentane Derivatives by Scandium-Catalyzed [3+2] Cycloaddition of Allylsilanes to  $\beta$ -Silylenones



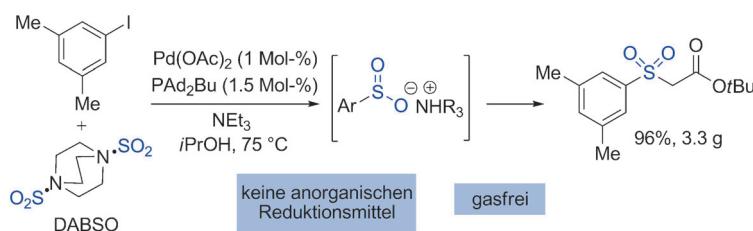
**Ligamentausch:** Ein dimerer Magnesium(I)-Komplex wurde durch eine einfache Redoxreaktion mit einem bekannten Magnesium(I)-Komplex synthetisiert. Der

neue Komplex wird durch einen hoch-oxidierten Phosphoranliganden stabilisiert und geht eine C-C-Kupplung mit *tert*-Butylisocyanat ein.

## Metall-Metall-Bindungen

A. Stasch\* \_\_\_\_\_ **10364 – 10367**

Synthesis of a Dimeric Magnesium(I) Compound by an  $Mg^{I}/Mg^{II}$  Redox Reaction



**'SO'2 vielseitig:** Ein Reaktionsgemisch aus einem Arylhalogenid, dem  $SO_2$ -Surrogat DABSO, einem  $Pd^0$ -Katalysator, Isopropylalkohol und Triethylamin bietet effizienten Zugang zu Ammoniumsulfonatsalzen. Der Isopropylalkohol dient als Lösungs- und

formales Reduktionsmittel zugleich, sodass die Sulfinat-Zwischenstufen ohne gasförmige Reagenzien oder anorganische Reduktionsmittel erhalten werden. Die Salze können in Sulfone, Sulfonamide und Sulfonylchloride überführt werden.

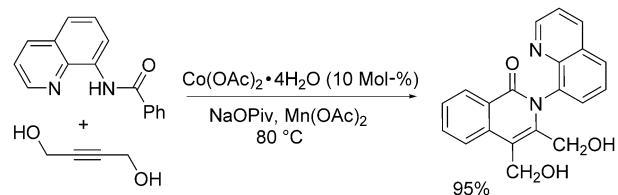
## Synthesemethoden

E. J. Emmett, B. R. Hayter,  
M. C. Willis\* \_\_\_\_\_ **10368 – 10372**

Palladium-Catalyzed Synthesis of Ammonium Sulfonates from Aryl Halides and a Sulfur Dioxide Surrogate: A Gas-and Reductant-Free Process

**C-H-Aktivierung**

L. Grigorjeva,  
O. Daugulis\* **10373 – 10376**

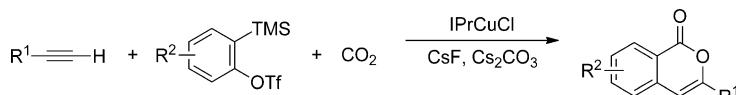


**Hohe Toleranz** für funktionelle Gruppen wird in der Titelreaktion beobachtet, wobei sowohl interne als auch terminale Alkine als Substrate dienen können.

$\text{Co}(\text{OAc})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  dient als Katalysator,  $\text{Mn}(\text{OAc})_2$  als Cokatalysator und Luftsauerstoff als Oxidationsmittel. Piv = Pivalat.

**Synthesemethoden**

W.-J. Yoo, T. V. Q. Nguyen,  
S. Kobayashi\* **10377 – 10381**



Eine einfache Synthese von Isocumarinen bietet die Dreikomponentenkupplung zwischen 1-Alkinen, 2-(Trimethylsilyl)aryltriflaten und  $\text{CO}_2$  (siehe Schema). Der Schlüssel zu dieser Reaktion ist die Ver-

wendung eines vielseitig einsetzbaren Komplexes aus einem N-heterocyclischen Carben und Kupfer, der mehrere Transformationen dieser Dreikomponentenreaktion katalysiert.



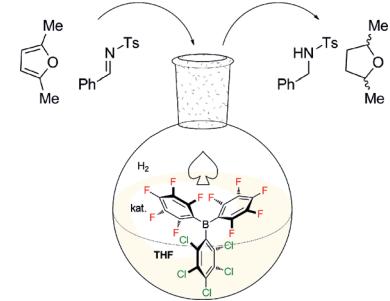
**H₂-Aktivierung**

D. J. Scott, M. J. Fuchter,  
A. E. Ashley\* **10382 – 10386**



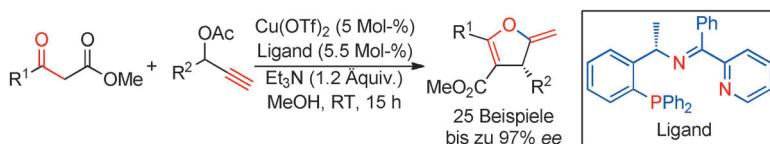
Metal-Free Hydrogenation Catalyzed by an Air-Stable Borane: Use of Solvent as a Frustrated Lewis Base

**THF ist die Lösung:** THF-Lösungen der luftbeständigen Borane  $\text{B}(\text{C}_6\text{Cl}_5)_x(\text{C}_6\text{F}_5)_{3-x}$  ( $x=0-3$ ) aktivieren  $\text{H}_2$  für die katalytische Hydrierung ungesättigter Substrate, wobei das Lösungsmittel den Part einer „frustrierten“ Lewis-Base übernimmt. Schwach basische Substrate wie *N*-Tosylimine sowie Pyrrol- und Furanderivate (neue Substrate für derartige Hydrierungen) werden unter vergleichsweise milden Bedingungen umgesetzt.



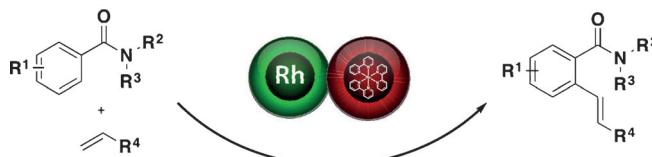
**Asymmetrische Katalyse**

F.-L. Zhu, Y.-H. Wang, D.-Y. Zhang, J. Xu,  
X.-P. Hu\* **10387 – 10391**



**Die Kombination** aus  $\text{Cu}(\text{OTf})_2$  und einem chiralen dreizähnigen  $\text{P},\text{N},\text{N}$ -Liganden als Katalysator ermöglichte die Titelreaktion, die eine Vielzahl von 2-Methylen-2,3-dihydrofuranen in guten Ausbeuten und guten

bis sehr guten Enantioselektivitäten lieferte. Außerdem kann die exocyclische Methylengruppe diastereoselektiv hydriert werden, wobei ungewöhnliche *cis*-2,3-Dihydrofuranerivate entstehen.



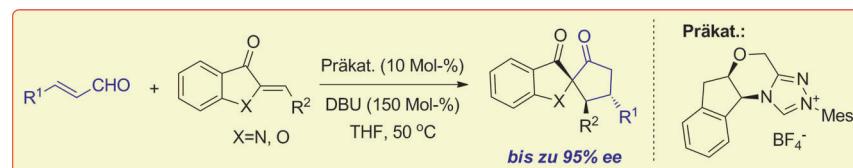
**Deutlich milder und umweltfreundlichere** Reaktionsbedingungen erhält man, wenn bei der oxidativen Heck-Reaktion Rhodium- und Photoredoxkatalyse kombiniert werden. Dadurch kann der Rho-

diumkomplex katalytisch regeneriert werden. Die Reaktion toleriert eine große Substratbreite und ergibt verschiedenste Amide in guten bis sehr guten Ausbeuten.

### C-H-Funktionalisierung

D. C. Fabry, J. Zoller, S. Raja,  
M. Rueping\* **10392 – 10396**

Kombinierte Rhodium- und Photoredoxkatalyse in der C-H-Funktionalisierung von Arenen: oxidative Heck-Reaktionen mit sichtbarem Licht



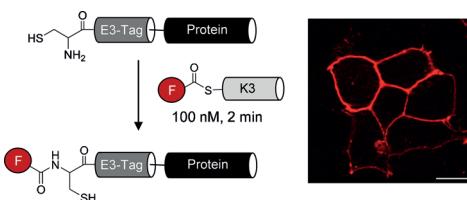
**Ring, Ring:** Eine durch N-heterocyclische Carbene (NHC) katalysierte formale [3+2]-Anellierung von  $\alpha,\beta$ -ungesättigten Aldehyden mit Azauronen oder Auron wurde entwickelt, die Spiroheterocyclen

mit hoher Enantioselektivität liefert. Dieses Protokoll bietet einen einzigartigen Zugang zu spiroheterocyclischen Strukturen mit einem quartären Stereozentrum.

### Asymmetrische Organokatalyse

C. Guo, M. Schedler, C. G. Daniliuc,  
F. Glorius\* **10397 – 10401**

Durch N-heterocyclische Carbene katalysierte formale [3+2]-Anellierungen von Enalen: enantioselektiver Zugang zu Spiroheterocyclen



**Coiled-Coil-Bildung** bringt ein Thioester-verbindenes Reporter-K3-Peptid in räumliche Nähe zum einem E3-tragenden Membranprotein, um den schnellen Transfer des Reporters vom Markierungsgen auf das Zielprotein auszulösen (links im Bild). Hohe Zielspezifität,

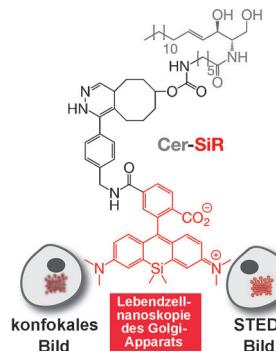
Schnelligkeit, geringe Konzentration an Markierungsgen und minimaler Massenzuwachs ermöglichen das fluoreszenzmikroskopische Imaging des humangen Y<sub>2</sub>-Rezeptors an lebenden Zellen (rechts).

### Proteinmarkierung

U. Reinhardt, J. Lotze, S. Zernia, K. Mörl,  
A. G. Beck-Sickinger,  
O. Seitz\* **10402 – 10406**

Proteintemplat-vermittelter Acyltransfer: eine chemische Methode für die Markierung von Membranproteinen an lebenden Zellen

**Mithilfe einer Lipid-basierten Strategie** wurden die Struktur und Dynamik des Golgi-Apparats in lebenden Zellen mit hochauflösender Mikroskopie visualisiert. Die Methode basiert auf einem *trans*-Cycloocten-haltigen Ceramid-Lipid (Cer-TCO) und einem Tetrazin-markierten Nah-IR-Farbstoff (SiR-Tz). Diese reagieren zu Cer-SiR, das die Visualisierung des Golgi-Apparats mit 3D-Konfokalmikroskopie und hochauflösender Mikroskopie ermöglicht.



### Visualisierung des Golgi-Apparats

R. S. Erdmann, H. Takakura,  
A. D. Thompson, F. Rivera-Molina,  
E. S. Allgeyer, J. Bewersdorf, D. Toomre,\*  
A. Schepartz\* **10407 – 10412**

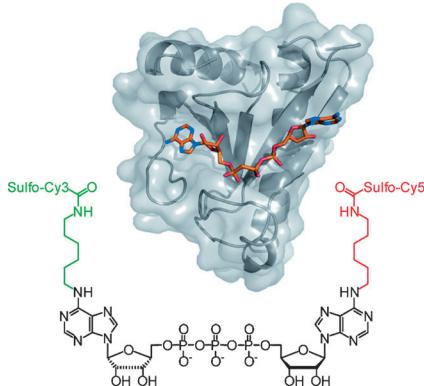
Hochauflöste Visualisierung des Golgi-Apparats in lebenden Zellen mit einem bioorthogonalen Ceramid

## Signalmoleküle

S. M. Hacker, F. Mortensen, M. Scheffner,  
A. Marx\* **10413 – 10416**

Selektive Beobachtung der enzymatischen Aktivität des Tumorsuppressors Fhit

**Fluorogene Sonden:** Das „fragile histidine triade protein“ (Fhit) ist eine Diadenosintriphosphat-Hydrolase, die häufig während der Entstehung von Krebs deaktiviert wird. Diese Arbeit beschreibt die Synthese einer neuen fluorogenen Sonde und ihren Einsatz zur Untersuchung der enzymatischen Aktivität von endogenem Fhit in Zelllysaten. Mit dieser Sonde werden Effektoren von Fhit in diesem biologisch relevanten System untersucht; sie wird daher tiefgreifende Einblicke in die Regulation von Fhit liefern.



Hintergrundinformationen sind unter [www.angewandte.de](http://www.angewandte.de) erhältlich (siehe Beitrag).

Diesen Artikel begleitet eines der Titelbilder dieses Hefts (Front- und Rückseite, innen und außen).

Eine Videodatei ist als Hintergrundinformation unter [www.angewandte.de](http://www.angewandte.de) oder vom Korrespondenzautor erhältlich.

Die als Very Important Paper (VIP) gekennzeichneten Beiträge müssen von zwei Gutachtern unisono als „sehr wichtig“ eingestuft worden sein.

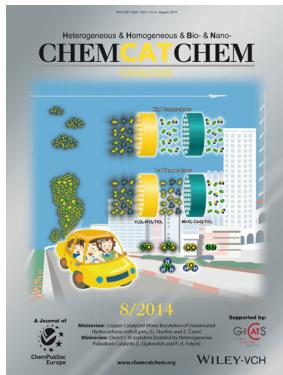
Dieser Artikel ist online frei verfügbar (Open Access).

Hot Paper – von der Redaktion auf der Basis von Gutachten als von großer Bedeutung für ein besonders intensiv bearbeitetes Forschungsgebiet eingestuft.

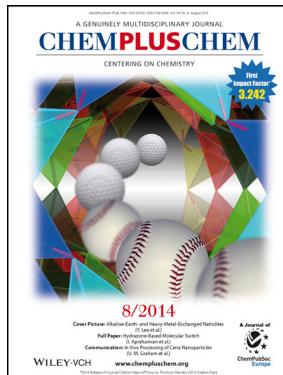
## Weitere Informationen zu:



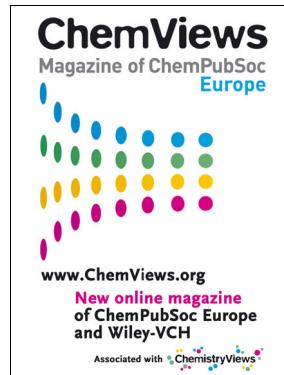
[www.chemasianj.org](http://www.chemasianj.org)



[www.chemcatchem.org](http://www.chemcatchem.org)



[www.chempluschem.org](http://www.chempluschem.org)



[www.chemviews.org](http://www.chemviews.org)