

Publikationsliste

A.1 Veröffentlichungen

A.1.1 Titelseiten von wissenschaftlichen Journalen



Abbildung A.1: Titelseiten in „Organic and Biomolekular Chemistry“ und ganzjährige Titelseite 2007 vom „Journal of Applied Crystallography“

Visualisierungen mit dem Programm Moliso sind bereits auf den Titelseiten von vier wissenschaftlichen Zeitschriften erschienen.

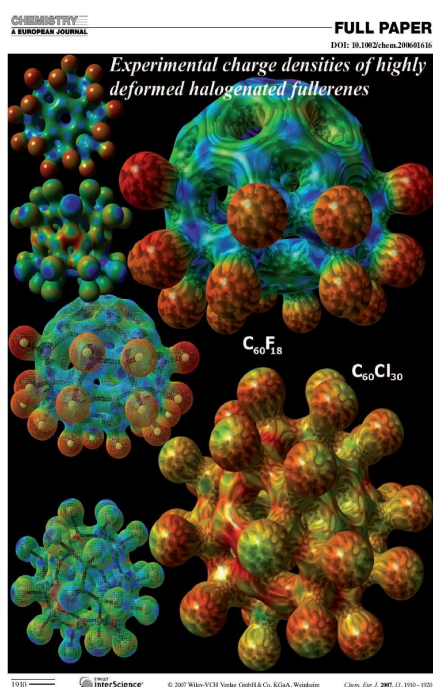


Abbildung A.2: Frontispiece in „Chemistry- A European Journal“ und Titelseite von „European Journal of Organic Chemistry“

A.1.2 Veröffentlichungen in Wissenschaftlichen Zeitschriften

1. C. B. Hübschle, B. Dittrich, S. Grabowsky, M. Messerschmidt, P. Luger: *A comparative experimental electron density and ELF study of thymidine based on 20 K X-ray diffraction data.* *J. Phys. Chem. A* 2007 eingereicht.
2. R. Kalinowski, B. Dittrich, C. B. Hübschle, C. Paulmann und P. Luger. *Experimental charge density of l-alanyl-l-prolyl-l-alanine hydrate: classical multipole and invariom approach, analysis of intra- and intermolecular topological properties* *Acta Crystallogr.*, **B63** 2007 im Druck.
3. C. B. Hübschle, P. Luger und B. Dittrich. *Automation of invariom and of experimental charge density modeling of organic molecules with the preprocessor program InvariomTool* *J. Appl. Cryst.*, **40** 623–627 2007.
4. D. Förster, A. Wagner, C. B. Hübschle, C. Paulmann und P. Luger. *Charge Density of L-Alanyl-glycyl-L-alanine Based on X-Ray Data Collection Periods from 4 to 130 Hours* *Z. Naturforsch.*, **62b**, 696–704 2007.
5. C. B. Hübschle, S. Scheins, M. Weber, P. Luger, A. Wagner, T. Koritsánsz-

- ky S. I. Troyanov, O. V. Boltalina und I. V. Goldt . *Bond Orders and Atomic Properties of the Highly Deformed Halogenated Fullerenes C₆₀F₁₈ and C₆₀Cl₃₀ Derived from their Charge Densities* *Chem. Eur. J.*, **13**, 1910–1920, 2007.
6. C. B. Hübschle und P. Luger. *Mollso - a program for colour-mapped iso-surfaces* *J. Appl. Cryst.*, **39**, 901–904, 2006.
 7. B. Dittrich, C. B. Hübschle, P. Luger und M. A. Spackman . *Introduction and validation of an invariom database for amino-acid, peptide and protein molecules* *Acta Crystallogr.*, **D62**, 1325–1335, 2006.
 8. R. Kingsford-Adaboh, B. Dittrich, C. B. Hübschle, W. S. K. Gbewonyo, H. Okamoto, M. Kimura und H. Ishida. *Invariom structure refinement, electrostatic potential and toxicity of 4-O-methylalpinumisoflavone, O,O-dimethylalpinumisoflavone and 5-O-methyl-4-O-(3-methylbut-2-en-1-yl)alpinum-isoflavone* *Acta Crystallogr.*, **B62**, 843–849, 2006.
 9. L. Chęcińska, S. Mebs, C. B. Hübschle, D. Förster, W. Morgenroth und P. Luger. *Reproducibility and transferability of topological data: experimental charge density study of two modifications of L-alanyl-L-tyrosyl-L-alanine* *Org. Biomol. Chem.*, **4 (17)**, 3242–3251, 2006.
 10. P. Luger, A. Wagner, C. B. Hübschle und S. I. Troyanov. *Experimental advances for high-speed evaluation of electron densities* *J. Phys. Chem.*, **A109 (45)**, 10177–10179, 2005.
 11. B. Dittrich, C. B. Hübschle, M. Messerschmidt, R. Kalinowski, D. Girnt and P. Luger. *The invariom model and its application: refinement of D,L-serine at different temperatures and resolution* *Acta Crystallogr.*, **A61**, 314–320, 2005.
 12. C. B. Hübschle, M. Messerschmidt, D. Lentz und P. Luger.. *Charge density redetermination and topological analysis of β-diboran at 94 K* *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **630 (8-9)**, 1313–1316, 2004.
 13. C. B. Hübschle, M. Messerschmidt und P. Luger. *Crystal structure of DL-tryptophan at 173K* *Cryst. Res & Tec.*, **39 (3)**, 274–278, 2004.
 14. C. B. Hübschle, B. Dittrich and P. Luger. *L-tryptophan formic acid solvate at 183 K* *Acta Crystallogr.*, **C58**, O540–O542, 2002.

A.1.3 Posterbeiträge

1. B. Dittrich, C. B. Hübschle, P. Luger. *Invarioms for Automated Low Order Data Charge Density Analysis*. **Tag der Chemie**, Potsdam, 7. Juli 2004.
2. B. Dittrich, M. Messerschmidt, C. B. Hübschle, M. Strumpel, P. Luger. *Invarioms for Automated Low Order Data Charge Density Analysis: Optimizing Conditions*. **(ECM22)**, 22nd European Crystallographic Meeting, 26.-31. August 2004 in Budapest, Hungary.
3. C. B. Hübschle, D. Lentz, P. Luger. *Experimentelle Ladungsdichtebestimmung an arachno-Tetraboran (B_4H_{10} bei 100 K)*. 13. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie **(DGK)** in Köln, März 2005.
4. S. Mebs, C. B. Hübschle, P. Luger. *Charge density of Amino Acids with strong hydrogen bonds: A comparative study*. XX Congress of the International Union of Crystallography **(IUCr)**, Florence, 23-31 August 2005.
5. C. B. Hübschle, P. Luger. *Thymidin Invariom Transfer und Multipole Refinement of 20K data set, a Comparison*. XX Congress of the International Union of Crystallography **(IUCr)**, Florence, 23-31 August 2005.
6. B. Dittrich, F. P. A. Fabbiani, C. B. Hübschle, P. Luger, M. A. Spackman. *An Invariom Database for Structural Refinement of High-Resolution Synchrotron Protein Data*. University of Melbourne, Australia, December 2005.
7. S. Scheins, C. B. Hübschle, S. I. Troyanov, M. Weber, A. Wagner, T. Koritsánszky, P. Luger. *Charge Density Investigations of the Highly Deformed Halogenated Fullerenes $C_{60}F_{18}$ and $C_{60}Cl_{30}$* . AK14 **(DGK)** The Workshop "Electron Density - Theory and Applications, Computational Crystallography, in Aachen, 19.-21.2.2006.
8. C. B. Hübschle, B. Dittrich and P. Luger. *Visualization of experimental charge density properties with MOLISO*. AK14 **(DGK)** The Workshop "Electron Density - Theory and Applications, Computational Crystallography, in Aachen, 19.-21.2.2006.
9. D. Förster, C. B. Hübschle, D. Lentz and P. Luger. *Electron Density Analysis of Unusual Bonds in Boronclusters*. AK14 **(DGK)** The Workshop "Electron Density - Theory and Applications, Computational Crystallography, in Aachen, 19.-21.2.2006.

10. C. B. Hübschle, B. Dittrich und P. Luger. *Visualisierung von experimentell bestimmten Ladungsdichteigenschaften mit MOLISO*. 14. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (**DGK**) in Freiburg, 3.-6. April 2006.
11. S. Scheins, C. B. Hübschle, S. I. Troyanov, M. Weber, A. Wagner, T. Koritsánszky, P. Luger. *Charge Density Investigations of the Highly Deformed Halogenated Fullerenes C₆₀F₁₈ and C₆₀Cl₃₀*. **Tag der Chemie** 2006, Ort: TU Berlin 28. Juni 2006.
12. C. B. Hübschle, B. Dittrich und P. Luger. *Visualisierung von experimentell bestimmten Ladungsdichteigenschaften mit MOLISO*. **Tag der Chemie** 2006, Ort: TU Berlin 28. Juni 2006.
13. D. Förster, C. B. Hübschle, D. Lentz und P. Luger. *Electron Density Analysis of Unusual Bonds in Boronclusters*. **Tag der Chemie** 2006, Ort: TU Berlin 28. Juni 2006.
14. L. Chęcińska, D. Förster, E. Rödel, S. Scheins, R. Kalinowski, S. Mebs, C. B. Hübschle, B. Dittrich, W. Morgenroth, C. Paulmann, and P. Luger. *Recent experimental and methodical advances in the charge density studies on tripeptides of the type Ala-Xxx-Ala*. **Tag der Chemie** 2006, Ort: TU Berlin 28. Juni 2006.
15. C. B. Hübschle, B. Dittrich, M. Messerschmidt und P. Luger. *Electron density of some nucleosides and a base pair*. **Sagamore XV**, 13-18. August 2006.
16. L. Chęcińska, S. Mebs, C. B. Hübschle, D. Förster, W. Morgenroth, P. Luger. *Reproducibility and Transferability of Topological Data Experimental Charge Density Study of Two Modifications of L-alanyl-L-tyrosyl-L-alanine*. XVIII International Conference on Physical Organic Chemistry (**ICPOC-18**), Warsaw, Poland, 20-25. August 2006.

A.1.4 Vorträge auf nationalen und internationalen Tagungen

1. C. B. Hübschle, P. Luger. *MOLISO a Program For Colour Mapped Isosurfaces*. "4th European Charge Density Meeting" (**ECDM IV**), 25.1.-28.1.06, in Brandenburg/Havel, Germany.

2. C. B. Hübschle, M. Messerschmidt, D. Lentz und P. Luger. *Experimentelle Ladungsdichtebestimmung an β -Diboran (B_2H_6) bei 95 K.* 12. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft der Kristallographie (**DGK**) in Jena, März 2004.
3. C. B. Hübschle, P. Luger. *MOLISO a Program For Colour Mapped Isosurfaces.* AK14 (**DGK**) The Workshop "Electron Density - Theory and Applications, Computational Crystallography, in Aachen, 19.-21.2.2006.
4. C. B. Hübschle, P. Luger (invited lecture). *Experimental Electron Density Studies - Present Status and Future Aspects.* Workshop at **Diamond** Light Source, Cambridge, UK, 18.12.2006.
5. C. B. Hübschle, B. Dittrich, M. Messerschmidt, P. Luger. *Vergleich der Elektronendichte einiger Nukleoside und eines Watson & Crick-Basenpaars.* 15. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (**DGK**) in Bremen, 5.-9. März 2007.
6. D. Förster, C. B. Hübschle, S. Scheins, D. Lentz and P. Luger. *Electron Density Analysis of unusual Bonds in Boronclusters: $B_{10}H_{12}$ -bis-acetonitrile and B_4H_{10} .* "4th European Charge Density Meeting" (**ECDM IV**), 25.1.-28.1.06, in Brandenburg/Havel, Germany.
7. S. Scheins, C. B. Hübschle, S. I. Troyanov, M. Weber, A. Wagner, T. Koritsánszky, P. Luger. *Charge Density Investigations of the Highly Deformed Halogenated Fullerenes $C_{60}F_{18}$ and $C_{60}Cl_{30}$.* AK14 (**DGK**) The Workshop "Electron Density - Theory and Applications, Computational Crystallography, in Aachen, 19.-21.2.2006.