



G. R. Desiraju

Der auf dieser Seite vorgestellte Autor hat in den letzten zehn Jahren mehr als **10 Beiträge** in der Angewandten Chemie veröffentlicht; seine neueste Arbeit ist: „Nanoindentation in Crystal Engineering: Quantifying Mechanical Properties of Molecular Crystals“: S. Varughese, M. S. R. N. Kiran, U. Ramamurty, G. R. Desiraju, *Angew. Chem.* **2013**, 125, 2765–2777; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, 52, 2701–2712.



Die Forschung von G. R. Desiraju war auch auf dem Titelbild der Angewandten Chemie vertreten: „Kristall-Engineering: eine holistische Darstellung“: G. R. Desiraju, *Angew. Chem.* **2007**, 119, 8492–8508; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 8342–8356.

Gautam R. Desiraju

Geburtstag:	21. August 1952
Stellung:	Professor, Indian Institute of Science, Bangalore
E-Mail:	desiraju@sscu.iisc.ernet.in
Homepage:	http://sscu.iisc.ernet.in/gautam_r_desiraju.html
Werdegang:	1969–1972 BSc, St. Xavier's College, University of Bombay 1972–1976 Promotion bei David Y. Curtin und Iain C. Paul, University of Illinois, Urbana
Preise:	2000 Humboldt-Forschungspreis, TWAS Award in Chemistry; 2011–2014 Präsident der International Union of Crystallography
Forschung:	Kristall-Engineering ist die gezielte Synthese funktioneller molekularer Feststoffe. Wir befassen uns mit vielen Aspekten dieses interdisziplinären Themas: Synthesemethoden unter Einsatz supramolekularer Synthese, Untersuchung intermolekularer Wechselwirkungen und ihrer Charakteristika, Polymorphie, Pharmazeutika sowie Computer- und experimentelle Studien der Kristallstruktur-Landschaft. Wir nutzen Kryokristallographie, Ladungsdichteanalyse, Nanoindentierung und Kristallstrukturvorhersage für das Verständnis und das Design neuer Kristallstrukturen.
Hobbys:	Klassische Musik

Chemie macht Spaß, weil ... sie ein Angriff auf die Sinne ist!

Mein Lieblingszitat ist ... „To strive, to seek, to find, and not to yield“ aus Tennysons Gedicht „Ulysses“.

Wenn ich mir ein Alter aussuchen könnte, wäre ich ... 60, mein jetziges Alter.

Meine liebste Tageszeit ist ... 9 Uhr morgens.

Mein liebstes Molekül ist ... Benzol.

Wenn ich ein Jahr bezahlten Urlaub hätte, würde ich ... wieder mit dem Lernen der karnatischen Vokalmusik (südindische klassische Musik) beginnen.

Mein Lieblingsmaler ist ... Diego Velasquez.

Mein Lieblingskomponist ist ... Muthuswami Dikshitar (1775–1835), einer der musikalischen Dreifaltigkeit der karnatischen Musik.

Mein Lieblingsbuch ist ... „The Second World War, Volume 1: The Gathering Storm“ von Churchill.

Wenn ich ein Tier wäre, wäre ich ... ein Kater.

Die größte Herausforderung für Wissenschaftler ist ... sauberes Trinkwasser für alle.

Das bedeutendste geschichtliche Ereignis der letzten 100 Jahre war ... der zweite Weltkrieg.

Wenn ich ein Auto wäre, wäre ich ... a Premier Padmini (TMR 9579 oder AP9 796).

Mein erstes Experiment war ... tatsächlich erfolgreich.

Wie unterscheidet sich die chemische Forschung heute von der zu Beginn Ihrer Laufbahn?

Die Chemie hat sich nicht wirklich geändert, aber unsere Art zu forschen hat sich geändert. Der wichtigste Unterschied ist, dass die Beschaffung von Geld heute eine Sache für „Machos“ zu sein scheint. Je mehr Geld man bekommt, desto angesehener ist man. Auch die Studenten sind anders. Als ich 1972 in Illinois zu forschen anfang, waren wir 110 Studenten im ersten Promotionsjahr. Wir verteilten uns ziemlich gleichmäßig auf die Departmentsbereiche Organik, Anorganik, Physik und Analytik. Heute wählen die meisten Studenten ihr Thema mit Blick auf die Chancen bei der Stellensuche aus. Ein weiterer großer Unterschied ist

die Rolle des Internets und anderer elektronischer Medien bei der Informationsbeschaffung und dem Lesen der Literatur. Zu meiner Studienzeit las man regelmäßig die Chemical Abstracts (natürlich gedruckt). Die Studenten erinnerten sich an das, was sie gelesen hatten, und deckten viele Gebiete ab. Ein heutiger Student lädt jede Menge an Veröffentlichungen herunter, aber nur in dem kleinen spezialisierten Gebiet, das für sein momentanes Projekt oder Manuskript wichtig ist.

Was ist das Geheimnis, so viele erstklassige Arbeiten publiziert zu haben?

Das weiß ich eigentlich gar nicht. Qualität ist Qualität. Man hat sie oder hat sie nicht. Ich mache,

was ich für interessant und nützlich halte. Ich entscheide mich für eine bestimmte Forschung (z. B. die Untersuchung der C–H···O-Wasserstoffbrücke), wenn mir die Literatur dazu verwirrend vorkommt. Ich glaube, dass man zu hochwertigen Arbeiten kommt, wenn man entscheidende Lücken in einem Bereich identifiziert und anfängt, sie systematisch und emotionslos zu füllen. Jedes Gebiet, das einer einfachen Klassifizierung widersteht,

bietet fruchtbares Forschungsfeld. Als ich mit meiner unabhängigen Forschung begann, waren Organiker wie Physikochemiker sich sicher, dass das Kristall-Engineering nicht zu ihrem Gebiet gehört. Heute ist das Kristall-Engineering ein eigenes Thema, und denen, die sich damit befassen, ist es egal, ob sie als Organiker oder als Physikochemiker angesehen werden.

Meine fünf Top-Paper:

1. „Supramolekulare Synthese für das Kristall-Engineering – eine neue organische Synthese“: G. R. Desiraju, *Angew. Chem.* **1995**, *107*, 2541–2558; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1995**, *34*, 2311–2327.
Mehr als jede andere Veröffentlichung charakterisiert diese meine Arbeit, und als ich sie fertig geschrieben hatte, wurde mir klar, dass der Schlüssel zum Design organischer Kristallstrukturen der retrosynthetische Ansatz der organischen Chemie und nicht der Molekül→Kristall-Ansatz mithilfe von Atompotentialen und Rechnungen ist, der sich aus der physikalischen Chemie ableitet. Ich kann mit Bestimmtheit sagen, dass meine Forschungslaufbahn nach dem Verfassen dieser Arbeit nicht mehr die gleiche war. Während die meisten Übersichtsartikel nach dem Ereignis erscheinen, war dieser eine Blaupause für meine und viele andere künftige Arbeiten zum Kristall-Engineering.
2. „C–H···F Interactions in the Crystal Structures of Some Fluorobenzenes“: V. R. Thalladi, H.-C. Weiss, D. Bläser, R. Boese, A. Nangia, G. R. Desiraju, *J. Am. Chem. Soc.* **1998**, *120*, 8702–8710.
Hier schlugen wir vor, dass die schwächste Art von H-Brücken – die von „organischem“ Fluor gebildeten – eine entscheidende Rolle bei der Festlegung von Kristallstrukturen spielen. Die Arbeit war wichtig, weil sie eine lange (und rückblickend ziemlich unnötige) Debatte mit Jack Dunitz und Angelo Gavezzotti über die Bedeutung von chemischen Wechselwirkungen und sterischen Aspekten für die Kristallpackung, sprich über die Bedeutung von Synthonen an sich, auslöste. Ich behaupte, dass diese Debatte mit unserer Kristallstrukturanalyse von 1,2,3,5-Tetrafluorbenzol (*Cryst. EngComm* **2010**, *12*, 2079–2085) und der Veröffentlichung von Dunitz und Gavezzotti (*Cryst. Growth Des.* **2012**, *12*, 5873–5877), in der sie mit Rechnungen die Eignung fast aller supramolekularer Synthone aus meiner Arbeit von 1995 in der *Angewandte Chemie* bestätigten, weitgehend zum Erliegen kam. Die Arbeit von 1998 wird immer noch gelesen und zitiert, und es vergeht kaum ein Monat ohne eine neue Veröffentlichung über die C–H···F–C-Wasserstoffbrücke.
3. „Distinction between the weak hydrogen bond and the van der Waals interaction“: T. Steiner, G. R. Desiraju, *Chem. Commun.* **1998**, 891–892.
Diese Arbeit entstand unter ungewöhnlichen Umständen. Al Cotton und seine Mitarbeiter verwarfen die Idee von C–H···N-Wasserstoffbrücken auf sehr abfällige Art und verwendeten dabei veraltete Pauling-Konzepte (*Chem. Commun.* **1997**, 1673–1674). Thomas Steiner und ich beschlossen, nicht auf gleiche Art zu antworten, sondern Belege dafür zu liefern, dass

die schwächsten C–H···O-Brücken mit der Beteiligung nichtaktivierter Methylgruppen immer noch gerichtet sind, was in der dichten Me···Me-Packung nicht festzustellen ist, sprich, dass es sich um Wasserstoffbrücken handelt. Die Veröffentlichung brachte Cotton zum Schweigen und entwickelte sich zu einer ziemlich häufig zitierten Arbeit.

4. „Structural Studies of the System Na(saccharinate)·n(H₂O): A Model for Crystallization“: R. Banerjee, P. M. Bhatt, M. T. Kirchner, G. R. Desiraju, *Angew. Chem.* **2005**, *117*, 2571–2576; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, *44*, 2515–2520.
Hier handelt es sich um eine bemerkenswerte Erfahrung. Wir erhielten diese hydratisierten Kristalle eines sehr gängigen industriellen Nutrazeutikums zufällig und stellten fest, dass die Substanz je nach den Umgebungsbedingungen Wasser ziemlich einfach und schnell aufnimmt und abgibt. Die Kristalleinheit war groß, verschmutzt, nichteinheitlich und stark solvatisiert. Wir äußerten die Meinung, dass diese Struktur ein gutes Modell für einen Kristallkeim sei. Die Gutachter schätzten die Arbeit als „VIP Paper“ ein. Roger Davey focht unsere Interpretation kürzlich in einem Aufsatz in der *Angewandten Chemie* an, aber ich denke, es wird noch eine ganze Weile dauern, bis irgendjemand eine Kristallstruktur sieht (die definitionsgemäß einem Energieminimum entspricht), die ähnlich nahe der Energiemaximums-Spezies ist, die wir Kristallkeim nennen.
5. „Crystal Structures of Polynuclear Aromatic Hydrocarbons. Classification, Rationalisation and Prediction from Molecular Structure“: G. R. Desiraju, A. Gavezzotti, *Acta Crystallogr. Sect. B: Struct. Sci.* **1989**, *45*, 473–482.
Wie sollte ich diese Arbeit vergessen? Angelo Gavezzotti und ich hatten – in der Vor-E-Mail-Ära – gemeinsam, aber jeder in seinem Land, fast vier Jahre lang mit kondensierten aromatischen Kohlenwasserstoffen gearbeitet und vergeblich versucht, diese Arbeit über die Korrelation von Kristallstrukturen mit Molekülstrukturen zu veröffentlichen. Auch wenn viele der hier vorgebrachten Argumente bei polareren Derivaten nicht mehr gelten, was mich übrigens dazu brachte, über Synthone nachzudenken, erinnere ich mich an diese Veröffentlichung, weil beide Autoren nach ihrem Erscheinen schlagartig bekannt waren. Eine Veröffentlichung in einer Zeitschrift mit niedrigerem Impact-Faktor kann also wissenschaftliche Anerkennung bringen, wenn die Arbeit gut ist und im rechten Moment erscheint. Die Leute lesen Arbeiten, egal, wo sie erscheinen.

DOI: 10.1002/ange.201302516