

---

---

## Hochschullehrer im Fokus

### Prof. Dr. Peter Luger

*Freie Universität Berlin*

#### ■ Wissenschaftlicher Werdegang

Die wissenschaftliche Karriere von Peter Luger (geb. 1943) war zumindest am Anfang durch eine Reihe von Zufällen bzw. glücklichen Fügungen geprägt. Bei einem Lehramtsstudium in Mathematik und Physik war noch nicht abzusehen, dass er einmal in der chemischen Strukturforschung landen würde.

Als Ende der 60er Jahre der Studienabschluss näher rückte, wurde zur gleichen Zeit (Frühjahr 1967) das Institut für Kristallographie an der FU Berlin gegründet. P. Luger erfuhr per Zufall, dass man dort eine Hilfskraft mit EDV-Kenntnissen suchte, und es fügte sich, dass er als Hobby neben seinem Studium (zu der Zeit hatte ein Student noch gewisse Gestaltungsfreiheiten!) Programmierkenntnisse erworben hatte, was damals durchaus noch als exotisch galt. Luger bekam den Job und machte sich so nützlich, dass ihm nach dem Staatsexamen (Frühjahr 1968) der damalige Institutsdirektor Karl Plieth eine Doktorandenstelle anbot. Er nahm an und wechselte so zur Kristallographie, was er nie bereut hat.

Es fügte sich wieder, dass P. Luger von der Umbruchsituation in der Kristallographie profitieren konnte. Während man sich bis dahin an einer einzigen Röntgenstrukturanalyse monate- bis jahrelang, zum Teil erfolglos, abmühen musste, konnte er sich eines neuen Diffraktometers bedienen und Computerprogramme nutzen, die er entweder selbst installierte oder selbst schrieb. So war die Doktorarbeit in weniger als zwei Jahren fertig, und es ging nunmehr Schlag auf Schlag. Promotion 1970, Habilitation 1974, Assistenzprofessor, Heisenberg-Stipendiat, schließlich 1979 Berufung zum Universitätsprofessor für Kristallographie an der FU Berlin. 1993 erhielt er den Ruf auf eine Gastprofessur an der University of Okayama/Japan, den er aus privaten Gründen ablehnte.

#### Forschungsgebiete

Da ihn experimentelle Herausforderungen reizten, entschied P. Luger, in seiner Arbeitsgruppe die Tieftemperaturkristallographie zu etablieren. Er ließ zunächst eine Stickstoffgasstromanlage bauen, die damaligen kommerziellen Anlagen in mehrfacher Hinsicht überlegen war. Später baute die Gruppe ein Diffraktometer mit geschlossenem Heliumkryostaten, zunächst in einstufiger, dann in zweistufiger Form, mit dem tiefe Temperaturen beim Beugungsexperiment von ca. 10–15 K möglich waren. Dieser Messplatz war Anfang der 90er Jahre lange Zeit der einzige dieser Art in Deutschland und weltweit einer der wenigen, der tatsächlich im Alltagsbetrieb funktionierte, was mit einigen technischen Problemen zu tun hatte, deren Überwindung der Gruppe Luger gelang.

Damit waren die experimentellen Grundlagen gelegt, um sich von nun an der Elektronendichte(ED)-Bestimmung zu widmen, auf die sich die Forschung der Gruppe dann konzentrierte. Zusammen mit dem Theoretiker T. Koritsanzky baute P. Luger dieses Gebiet schwerpunktmäßig an der FU Berlin aus, unterstützt durch verschiedene großzügige Drittmittelförderungen. Das inzwischen wohl etablierte Programmsystem XD zur Berechnung und Analyse von ED-Verteilungen entstand unter der Federführung von T. Koritsanzky in dieser Zeit.

Als Mitte der 90er Jahre die CCD-Flächendetektionsdiffraktometer auf den Markt kamen, mit denen um Größenordnungen mehr Röntgenreflexe pro Zeiteinheit gemessen werden konnten als bisher, erkannte Luger sofort, dass damit ein zentrales Problem der experimentellen ED-Bestimmung, nämlich das der wochen- bis monatelangen Messperioden, gelöst werden konnte. Ein Schlüsselexperiment gelang im März 1997, als am HASYLAB in Hamburg mit Synchrotronprimärstrahlung und CCD-Flächendetektion in weniger als 24 h an einem D,L-Prolin-Kristall ein hochaufgelösten Datensatz von mehr als 33 000 Reflexen so genau gemessen wurde, dass eine detaillierte ED-Verteilung hergeleitet werden konnte.

Derzeit beschäftigt sich die Gruppe Luger mit methodischen und experi-

mentellen Entwicklungen zur ED und untersucht Anwendungen vorwiegend in den Life Sciences. Dort ist es eine fundamentale Herausforderung, die Erkennung und Wechselwirkung biologisch aktiver Systeme auf atomarer Ebene zu verstehen. Es gilt allgemein, dass nicht nur sterische Effekte sondern auch komplementäre elektronische Eigenschaften diese Erkennungsprozesse kontrollieren. Da experimentelle ED-Verteilungen u. a. Informationen über intermolekulare Wechselwirkungen im Kristall liefern, können sie als Modell für die Wechselwirkungen unter biologischen Bedingungen dienen und damit sterische Informationen ergänzen.

Dank der verfügbaren verbesserten experimentellen Möglichkeiten, zu denen zahlreiche Synchrotronmessplätze gehören, konnte die Gruppe eine Reihe von Anwendungen in den Life Sciences bearbeiten:

- ED-Untersuchungen an Protease-Inhibitor-Modellverbindungen in Kooperation mit verschiedenen pharmakologisch arbeitenden Gruppen (Löwe/Lüth, Berlin; Schirmeister, Würzburg);
- Vergleichende ED-Studien an ganzen Klassen biologisch verwandter Verbindungen, zunächst an einfachen Aminosäuren, dann an Oligopeptiden, Nucleosidbasen und Nucleosiden. Diese erlaubten eine experimentelle Verifizierung des von Richard Bader eingeführten Konzepts der Transferierbarkeit und Additivität submolekularer bzw. atomarer elektronischer Eigenschaften. Nach diesem Konzept kann die elektronische Struktur von Makromolekülen, die sonst der experimentellen ED-Bestimmung nur in Ausnahmefällen zugänglich sind, bausteinartig aus niedermolekularen Fragmenten zusammengesetzt werden, wenn man deren ED kennt. Auf dieser Grundlage sind Datenbankentwicklungen erfolgt, unter anderem die Invariom-Datenbank von B. Dittrich, Göttingen (der in der Gruppe von P. Luger promoviert hat), die elektronische Eigenschaften eines Atoms in einer gegebenen chemischen Umgebung bereitstellt und inzwischen vollständige Einträge in

der Klasse der Oligopeptide und -nucleotide enthält, so dass Anwendungen für eine große Zahl bioorganischer Verbindungen möglich sind.

- ED-Studien an großen Biomolekülen von 100 und mehr Atomen (Makrolid-Antibiotika, Vitamin B<sub>12</sub> und verwandte Cobalamine), mit denen die derzeitigen Grenzen der experimentellen ED-Untersuchung herausgefordert werden.

Ein weiteres Arbeitsgebiet (zum Teil in Kooperation mit S. I. Troyanov, Moskau) sind ED-Untersuchungen an Fullerenen, die wegen ihrer schlechten Kristallisierbarkeit und ihrer Neigung zur Fehlordnung im Kristall schwierige Kandidaten für ED-Untersuchungen sind. Trotzdem gelangen in einigen Fällen, u.a. an strukturchemisch hoch interessanten halogenierten C<sub>60</sub>-Fullerenen, so genaue Studien, dass quantitative atomare und Bindungseigenschaften hergeleitet werden konnten.

#### Lehre

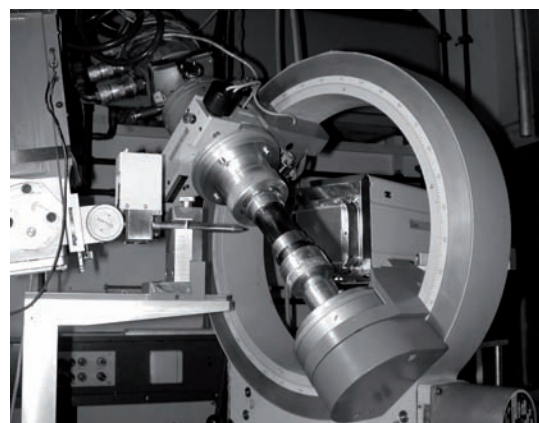
Die Wurzeln in der Mathematik legten es nahe, dass sich P. Luger der Mathematik für Chemiker annahm, so dass er diese Lehrveranstaltung zusammen mit anderen Kollegen des Instituts seit Jahrzehnten betreut. Hinzu kommen regelmäßig Kurse über praktische Kristallstrukturanalyse und andere spezielle kristallographische Vorlesungen. Ein besonderes Anliegen ist es ihm, seine Mitarbeiter intensiv bei ihren Examensarbeiten zum Diplom oder zur Promotion zu unterstützen. Dass dies weitgehend gelang, ist dadurch belegt, dass seine Mitarbeiter mehrmals mit Posterpreisen auf internationalen Tagungen ausgezeichnet wurden und Doktoranden renommierte Preise für ihre Dissertationen erhalten haben, darunter waren der Max-von-Laue-Preis 2007 der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie an seinen Mitarbeiter B. Dittrich.

#### Internationale Kooperationen

Seit Beginn seiner wissenschaftlichen Aktivitäten hat P. Luger großen Wert auf nationale und internationale Kooperationen gelegt, die er über rege Kongresstätigkeit, gemeinsame Forschungsvorhaben und die Ermöglichung von Gastaufenthalten ausländischer Wissenschaftler und Stipendia-



Arbeitsgruppe von Prof. P. Luger



Röntgendiffraktometer mit zweistufigem Heliumkryostat und CCD-Flächendetektor

ten (DAAD oder Humboldt) pflegt. So waren Wissenschaftler aus allen Kontinenten in seiner Gruppe zu Gast, wie er auch seine Mitarbeiter immer zur Teilnahme an internationalen Tagungen und sonstigen Auslandsaufenthalten ermuntert, was für ihn mit der nicht einfachen Aufgabe verbunden ist, die erforderlichen Finanzmittel zu organisieren.

Besondere und langjährige internationale Kontakte werden zu Gruppen in Schwellen- oder Entwicklungsländern in Afrika oder Südostasien gepflegt, bei denen moderne und teure kristallographische Ausstattung noch nicht verfügbar ist, so dass ihnen mit Experimenten zur Strukturbestimmung an Verbindungen aus der traditionellen Medizin geholfen wird, die in diesen Ländern in der Gesundheitsversorgung eine wichtige Rolle spielt.

#### Publikationstätigkeit

Aus den wissenschaftlichen Aktivitäten der Gruppe Luger sind bisher fast 350 Publikationen in referierten

Journalen und etwa gleich viele Tagungsbeiträge (Vorträge und Poster) entstanden. Bereits 1980 hat P. Luger sein Lehrbuch „Modern X-Ray Analysis on Single Crystals“ (den „roten Luger“) veröffentlicht. Später kamen Kapitelbeiträge zu Lehrbüchern von mehreren Autoren hinzu, darunter das Kapitel über Kristallstrukturen im Bergmann-Schäfer, Bd. 6, Festkörper, Auflagen 1992 und 2005.

### **Vision**

Die experimentellen und methodischen Fortschritte des letzten Jahrzehnts auf dem ED-Gebiet haben zu einer so enormen Entwicklung beigetragen wie sie vergleichsweise für die Röntgenstrukturanalyse in der 60er Jahren des vorigen Jahrhunderts stattgefunden hat. Nicht zuletzt durch die Vergabe des Chemie-Nobelpreises an Kohn im Jahr 1998 ist die Bedeutung der ED unterstrichen worden. Durch das Interesse an diesem Thema entwickelte sich eine Initiative mehrerer Forschergruppen, die einen DFG-Schwerpunkt „Elektronendichte“ (SPP 1178) etablieren konnten, in dem seit 2004 ca. 30 Gruppen erfolgreich unter der kompetenten Koordinierung von D. Stalke (Göttingen) zusammenarbeiten, so dass Deutschland jetzt zu den weltweit führenden Forschungsstandorten für die ED gehört.

P. Luger, der an diesen Entwicklungen an vielen Stellen beteiligt war, erwartet deshalb, dass sich die experimentelle ED-Bestimmung in der nächsten Zeit noch stürmisch weiter entwickeln wird und bei vertretbarem Aufwand zu einer routinemäßig anwendbaren Methode zur Charakterisierung intra- und intermolekularer elektronischer Eigenschaften wird, so wie es die Röntgenstrukturanalyse in den letzten Jahren zur Beschreibung struktureller Eigenschaften geworden ist.

### **Kontakt:**

Prof. Dr. Peter Luger  
Institut für Chemie  
Freie Universität Berlin  
Fabeckstr. 36a  
14195 Berlin  
Email: [luger@chemie.fu-berlin.de](mailto:luger@chemie.fu-berlin.de)  
Homepage: <http://userpage.chemie.fu-berlin.de/~vongrabo/luger/>