



KALLOL RAY

Von der Natur inspiriert

Bioanorganische Chemie

Meine Gruppe forscht auf dem Gebiet der bioanorganischen Chemie. Wir versuchen das Wissen über die Reaktivitäten in biologischen Systemen, die Übergangsmetalle wie Eisen oder Kupfer enthalten, zu erweitern und prinzipielle Trends abzuleiten. Dabei konzentrieren wir uns auf die Synthese von Modellkomplexen für Monoxygenase- und Oxidaseenzyme mit neuartigen Chelatliganden. Spektroskopische Untersuchungen, unterstützt durch theoretische Rechnungen, werden zur Charakterisierung genutzt. Aus diesen ergibt sich ein definiertes Bild der elektronischen Struktur dieser Modellkomplexe, das uns hilft, die Funktion von Enzymen besser zu verstehen.

Allgemeine Einführung in das Fachgebiet

Die bioanorganische Chemie ist ein interdisziplinärer Forschungszweig der Chemie, der zwischen anorganischer Chemie und Biologie angesiedelt ist. Sie befasst sich mit der Bedeutung und Funktion anorganischer Elemente wie Übergangsmetallen in Lebensprozessen, speziell in Enzymen, die ohne diese nicht ablaufen würden. Dabei werden Erkenntnisse aus der Biologie im Bereich der Enzymstrukturaufklärung genutzt, um mit chemischen Methoden strukturelle und funktionale Modelle für das aktive, metallhaltige Zentrum von Enzymen zu synthetisieren und chemische Umwandlungen für den Menschen nutzbar zu machen, die bisher nur in biologischen Systemen oder industriell unter großem Aufwand ablaufen. Hier-

Internet

www.chemie.hu-berlin.de/ray/



Abb. 1

Prof. Kallol Ray am Institut für Chemie der Humboldt-Universität zu Berlin.

zu gehören insbesondere die Aktivierung kleiner Moleküle wie H_2O , O_2 , CO_2 oder N_2 .

Forschungsgebiete

Wir konzentrieren uns in diesem Zusammenhang auf die während der Photosynthese ablaufende

Abstract

My group focuses on basic research to acquire knowledge from nature about the principles governing reactivities in biological systems, which employ common transition metals like iron or copper. My group synthesizes model complexes for monoxygenase and oxidase enzymes using newly designed chelating ligands. Spectroscopic techniques supported by theoretical calculations are used to characterize the complexes. A definite picture about the electronic structure of the model complexes is obtained, which will further our understanding on the actual enzymatic systems.

Wasserspaltung und den Einbau von molekularem oder atomarem Sauerstoff in organische Substrate. In der Natur übernimmt diese Aufgabe die Enzymklasse der Oxygenasen.

Für die Spaltung von Wasser in elementaren Wasser- und Sauerstoff muss eine O-O-Bindung gebildet werden. Der Mechanismus der O-O-Bindungsbildung wird bis heute kontrovers diskutiert. Außerdem gelang eine katalytische Wasserspaltung bisher nur mit in der Natur selten vorkommenden Metallen wie Ruthenium. Wir versuchen in unseren Arbeiten den Prozess der O-O-Bindungsbildung während der Wasserspaltung nicht nur besser zu verstehen, sondern diesen auch auf häufig vorkommende Metalle wie Eisen oder Mangan zu erweitern.

Kooperationen

- Prof. Dr. C. Limberg, HU Berlin, Massenspektrometrie, Infrarotspektroskopie, Tieftemperatur-NMR-Spektroskopie.
- Prof. Dr. T. Braun, Infrarotspektroskopie.
- Prof. Dr. H. Dau, FU Berlin, Röntgenabsorptionsspektroskopie.
- Prof. Dr. P. Comba, Universität Heidelberg, DFT-Rechnungen.
- Dr. E. Bill, Max-Planck-Institut für Bioanorganische Chemie Mülheim, Elektronenspinresonanzspektroskopie.
- Prof. Dr. T. Glaser, Dr. S. Walleck, Universität Bielefeld, Mössbauer-Spektroskopie.
- Dr. J. M. Luis, Dr. E. Matito, Universität Girona, Spanien, DFT-Rechnungen.
- Prof. Dr. P. Hildebrandt, TU Berlin, Resonanzraman-Spektroskopie.
- Prof. Dr. T. Jackson, Universität Kansas, USA, MCD-Spektroskopie

Zur Übertragung eines Sauerstoffatoms aus molekularem Sauerstoff der Luft ist hingegen die Spaltung einer O-O-Bindung und die Stabilisierung einer hochoxidierten Metall-Sauerstoff-Spezies notwendig. Unsere Forschung konzentriert sich auf diesem Gebiet auf die Untersuchung der elektronischen Einflüsse, die die O-O-Bindung schwächen und eine Spaltung dieser begünstigen sowie auf die Stabilisierung und Charakterisierung hochoxidiert und hochreaktiver Metall-Oxido-Spezies der späten Übergangsmetalle wie Cobalt oder Nickel, die selbst chemisch inerte C-H-Bindungen aktivieren können.

Ausgewählte Publikationen

- P. Haack, K. Ray, C. Limberg et al., *Inorg. Chem.*, 2011, 50 (6), 2133.
- A. Company, K. Ray, M. Driess et al., *Chem. Eur. J.* 2010, 16, 9669.
- F. F. Pfaff, K. Ray et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, 50, 1711.

Dr. Kallol Ray

Jg. 1978, 2001 MSc Indian Institute of Technology, Kanpur, Indien; 2001–2005 PhD (Summa cum Laude) Max-Planck-Institut für Bioanorganische Chemie, Mülheim, bei Prof. Dr. Karl. Wieghardt; 2005–2006 Postdoc bei Prof. Dr. Karl Wieghardt am Max-Planck-Institut für Bioanorganische Chemie, Mülheim; 2006–2008 Postdoc bei Prof. Lawrence Que Jr. an der Universität von Minnesota, USA; seit 2009 Nachwuchsgruppenleiter an der Humboldt-Universität zu Berlin, innerhalb des UniCat Exzellenzclusters. 2015 Ruf an die HU-Berlin auf W3 Professur am Institut für Chemie.

Humboldt-Universität zu Berlin • Institut für Chemie

E-Mail: kallol.ray@chemie.hu-berlin.de

www.chemie.hu-berlin.de/ray/