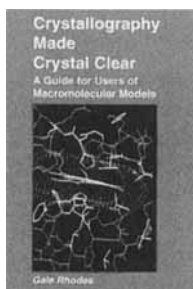


Proteinkristallographie für Biochemiker

Crystallography made Crystal Clear. A Guide for Users of Macromolecular Models. Von *G. Rhodes*. Academic Press, New York, 1993. 202 S., Broschur, \$ 34.95. – ISBN 0-12-587075-2

Mit der raschen Entwicklung der Molekularbiologie und hier besonders der Gentechnik wachsen das Bedürfnis und die Notwendigkeit, die dreidimensionalen Strukturen von biologischen Makromolekülen in atomarem Detail zu kennen. Nur so ist es möglich, ihre Funktionsmechanismen zu verstehen und ihre Wirkungsweise mit Methoden des Protein-Design und des Drug-Design gezielt zu steuern. Es gibt zwei Methoden der Strukturbestimmung: NMR-Spektroskopie und Kristallographie. Die NMR-Spektroskopie hat den Vorteil, in Lösung arbeiten zu können, aber bei Molekülmassen über 20 000 Da ergeben sich methodische Schwierigkeiten. Diese Beschränkung entfällt bei der Kristallographie, die jedoch notorisch mit den Schwierigkeiten behaftet ist, Kristalle zu bekommen und Schweratomderivate der Kristalle herzustellen, die zur Lösung des „Phasenproblems“ in der Kristallographie benötigt werden.

Wollte sich der Molekularbiologe oder Biochemiker in die Proteinkristallographie einlesen, so konnte er sich bisher in Biochemie- oder Biophysik-Lehrbüchern informieren, in denen ein oder zwei Kapi-



tel der Kristallographie gewidmet sind, oder in Lehrbüchern der Proteinkristallographie, die im allgemeinen zu ausführlich und zu sehr mit Mathematik behaftet sind, um mit Freude lesbar zu sein. Das jetzt vorgelegte Buch von Gale Rhodes füllt genau diese Lücke. Es erklärt auf knappen 200 Seiten mit vielen Bildern und wenigen mathematischen Formulierungen, wie der Gang einer Kristallstrukturanalyse verläuft – vom Kristallisieren eines Proteins bis zur endgültigen Verfeinerung der Struktur. Dazu gibt es Hinweise auf die Gültigkeit von Modellen und, was ich als wesentlich erachte, eine Anleitung zum Lesen kristallographischer Publikationen.

Im Detail geht das Buch auf folgende Themen ein: In Kapitel 1 werden mit farbigen Abbildungen Elektronendichteverteilungen von Proteinkristallen und deren Interpretation in Form von Modellen dargestellt, um den Leser für die Resultate der Kristallographie zu begeistern. Kapitel 2 gibt einen allgemeinen Überblick über das Gebiet der Proteinkristallographie und ist als Zusammenfassung der folgenden Kapitel zu sehen. In Kapitel 3 erfährt der Leser, wie Proteine und Nucleinsäuren kristallisiert werden, in Kapitel 4 werden die Diffraktion am Kristallgitter im Detail erklärt und die Messung der Röntgendiffraktionsdaten mit Kameras (Film) und mit modernen Flächenzählern erläutert. Die Kapitel 5 und 6 zeigen, wie die für die Berechnung der Elektronendichte-Verteilung wesentlichen Phasenwinkel in de-novo-Strukturen über den „Isomorphen Ersatz“ durch Schweratome mit Patterson-Methoden erhalten werden, während der „Molekulare Ersatz“ angewendet werden kann, wenn bereits ähnliche, verwandte Strukturen bekannt sind. Weiterhin werden Modifikationen der Elektronendichte-Verteilung („Solvent Flattening“) besprochen, mit denen sich das Signal-Rausch-Verhältnis wesentlich steigern läßt. In Kapitel 7 geht es vor allem um die Abschätzung der Qualität einer Elektronendichte-Verteilung, ihre Interpretation mit dem graphischen Bildschirm in Form von Modellen und die Verfeinerung dieser Modelle auf der Basis der gemessenen Diffraktionsdaten. In Kapitel 8 werden Qualitätskriterien der Mo-

delle wie Ramachandran-Plot, Temperaturfaktoren, ungeordnete Regionen in den Modellen und unerklärte Elektronendichte, die Solvens-Molekülen zugeordnet werden kann, beschrieben. Das Kapitel schließt mit der Analyse einer Publikation über ein Lipid-bindendes Protein, welche die vorhergehenden sieben Kapitel erläuternd zusammenfaßt. In Kapitel 9 finden sich Ausflüge in die Software, mit der Molekülmodelle auf Displays dargestellt und manipuliert werden können.

Der Text ist sehr flüssig geschrieben und kann auch von Außenstehenden rasch aufgenommen werden. Die wenigen mathematischen Formeln sind wichtig, um die Zusammenhänge zu beschreiben, und die instruktiven Abbildungen sind gut gewählt. Das kleine Buch wird seinem Zweck, die Brücke zwischen Molekularbiologen und Biochemikern sowie Proteinkristallographen zu schlagen, voll gerecht, und ich empfehle es für alle, die sich mit Molekülstrukturen beschäftigen. Das Buch eignet sich wegen der Kürze des Textes und der guten Darstellung („crystal clear“) ausgezeichnet als Begleitung für Praktika oder Einführungskurse über Proteinkristallographie.

Wolfram Saenger
Institut für Kristallographie
der Freien Universität Berlin

Symmetrie und Struktur in der Chemie. Von *D. Steinborn*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1993. 435 S., geb. 148.00 DM. – ISBN 3-527-28418-4

Wie schon aus der Formulierung des Titels hervorgeht, wendet sich das vorliegende Buch zwar in erster Linie an Chemiker(innen), darüber hinaus ist es aber auch für Wissenschaftler(innen) aus angrenzenden Fachgebieten (Kristallographie, Mineralogie, Physik) durchaus von Interesse.

Das Buch beginnt mit einem Kapitel zum Symmetriekonzept, welches auch einen tabellarischen Überblick über die historischen Entwicklungen vermittelt. Im zweiten Kapitel, „Moleküle und ihre Struktur“ (39 Seiten), werden die Grund-

Diese Rubrik enthält Buchbesprechungen und Hinweise auf neue Bücher. Buchbesprechungen werden auf Einladung der Redaktion geschrieben. Vorschläge für zu besprechende Bücher und für Rezensenten sind willkommen. Verlage sollten Buchankündigungen oder (besser) Bücher an Dr. Ralf Baumann, Redaktion Angewandte Chemie, Postfach 101161, D-69451 Weinheim, Bundesrepublik Deutschland, senden. Die Redaktion behält sich bei der Besprechung von Büchern, die unverlangt zur Rezension eingehen, eine Auswahl vor. Nicht rezensierte Bücher werden nicht zurückgesandt.

lagen der Quantenmechanik und die Born-Oppenheimer-Näherung erläutert. Darauf folgt jeweils ein Abschnitt über statische und dynamische Aspekte bei der Beschreibung von Molekülstrukturen, über Vektorbasen und Koordinatensysteme allgemein sowie über die Koordinatensysteme, in denen molekulare Systeme beschrieben werden. Das dritte Kapitel (57 Seiten) gibt eine straffe und recht umfassende, aber dennoch gut lesbare Einführung in die Gruppentheorie. Außer grundlegenden Definitionen enthält es Abschnitte, die sich mit Untergruppen und Erzeugendensystemen, mit Nebenklassen und Konjugiertenklassen, mit Isomorphie und Homomorphie sowie mit direkten und semidirekten Produkten von Gruppen befassen. Nützlich ist ein dreiseitiges Glossar, in dem die wichtigsten Begriffe der Gruppentheorie alphabetisch zusammengestellt sind. Im vierten Kapitel, „Bewegungen im Raum und Symmetrie“ (48 Seiten), werden Transformationen im Vektor- und Punktraum, speziell orthogonale Transformationen, eingeführt. Danach werden die Typen orthogonaler Transformationen im R^1 , R^2 und R^3 einzeln behandelt. Es folgt ein kurzer Überblick über die vollständigen Bewegungsgruppen in diesen Räumen und ihre Untergruppen. Den Schluß bilden ein Abschnitt über die Symmetrie von Figuren und wieder ein Glossar. Das fünfte Kapitel, „Grundlagen der Molekülsymmetrie“ (83 Seiten), beschäftigt sich ausführlich mit kristallographischen und nicht-kristallographischen Punktgruppen. Es werden die eigentlichen und uneigentlichen Symmetrioperationen, ihre Produkte und ihre Kombinationen vorgestellt. Die Punktgruppen des R^3 werden der Schoenflies-Nomenklatur folgend systematisch abgeleitet. Ausführliche Beispiele zur Symmetrie von Molekülstrukturen schließen sich an. Im Abschnitt „Spezielle Probleme molekularer Symmetriegruppen“ werden dann endlich auch die internationalen Punktgruppensymbole, allerdings leider nur recht knapp, vorgestellt. Ferner wird auf Konjugiertenklassen von Symmetrioperationen, Punktkonfigurationen und Punktlagen sowie asymmetrische Einheiten eingegangen. Das sechste Kapitel, „Grundlagen der Kristallsymmetrie“ (132 Seiten), befaßt sich im wesentlichen mit den Raumgruppen. Es werden Bravais-Gitter und Bravais-Systeme behandelt, außerdem Gleitspiegelungen und Schraubungen, Translationennormalteiler von Raumgruppen sowie die zugehörigen Nebenklassenzerlegungen und Faktorguppen. Die internationale Raumgruppensymbolik wird eingeführt. Danach werden alle Ebenengruppen und Bei-

spiele für Raumgruppen behandelt. Weitere Abschnitte beschäftigen sich mit translationengleichen und klassengleichen Untergruppen, mit Gitterkomplexen und Kristallstrukturtypen sowie Quasikristallen. Es folgt ein Abschnitt über den Zusammenhang zwischen Symmetrie und Kristallmorphologie sowie physikalischen Eigenschaften. Den Schluß bildet eine kurze Beschreibung von Antisymmetriegruppen. Im siebten Kapitel, „Permutations(inversions)symmetrien molekularer Systeme“ (30 Seiten), wird auf den Zusammenhang zwischen Symmetrien und Erhaltungssätzen eingegangen. Außerdem werden Permutationssymmetrien von Elektronen und Atomkernen behandelt, Korrespondenzen zwischen Molekül- und Punktsymmetriegruppen gezeigt und die Symmetrien des molekularen Hamilton-Operators erläutert. Es folgt ein nützlicher Anhang mit mathematischen Grundbegriffen und den Listen dreier kleiner BASIC-Programme. Das Literaturverzeichnis ist mäßig umfangreich (4 Seiten), das Register genau und zuverlässig.

Das Buch ist in weiten Passagen flüssig und gut verständlich geschrieben, ohne dabei ungenau zu werden oder unzulässig zu vereinfachen. Die vielen eingestreuten Beispiele illustrieren den Inhalt und machen ihn leichter verständlich. Der Text ist sehr sorgfältig formuliert und enthält nur recht wenige kleinere (Druck-)Fehler. Positiv sind auch die biographischen Kurzangaben (in Fußnoten) zu allen erwähnten Naturwissenschaftlern hervorzuheben. Trotzdem gibt es natürlich in der ersten Auflage einer so umfangreichen Neuerscheinung einige Punkte, die sich verbessern ließen: Erstmals verwendete Begriffe könnten im Text drucktechnisch hervorgehoben werden. Die verwendeten Bezeichnungen sollten innerhalb des Buches vereinheitlicht werden (z.B. Elementarregion in Kap. 5.6, asymmetrische Einheit in Kap. 6.4). Die internationale Symbolik für Punktgruppen sollte etwas früher eingeführt und eingehender behandelt werden. Man könnte die internationalen Symbole immer zusätzlich in Klammern angeben, wie es in Kapitel 6.5.4 bereits geschehen ist. Dadurch würde auch der Bruch in der Gesamtdarstellung vermieden, der dadurch entsteht, daß der Autor ab Kapitel 6 auf die internationalen Symbole z.B. für Schraubenachsen oder für Raumgruppen nicht mehr verzichten kann. Die vielen Abbildungen sind für das Verständnis sehr hilfreich, einige wenige sind jedoch nicht so klar, wie es wünschenswert wäre. Der Text wird häufig durch Beispiele, Beweise, Abbildungen oder Tabellen unterbrochen. Das

ist gestalterisch nicht immer optimal gelöst, so daß man an manchen Stellen Mühe hat, die Fortsetzung des Textes zu finden. Kapitel 6.4.7 über Quasikristalle sollte entweder ganz gestrichen oder grundsätzlich überarbeitet werden.

Das Buch hat unter der deutschsprachigen Literatur keine Konkurrenz und bereichert das bestehende Angebot wesentlich. Es ist empfehlenswert für alle, die sich mit Molekülsymmetrien oder Kristallsymmetrien befassen. Wünschenswert wäre eine zweite Auflage, welche durch eine preisgünstigere Paperback-Ausgabe ergänzt werden sollte.

Elke Koch

Institut für Mineralogie,
Petrologie und Kristallographie
der Universität Marburg

Introduction to Molecular Cloning Techniques. Von G. Lucotte und F. Baneyx. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York, 1993. 298 S., geb. 79.00 DM/49.00 \$. – ISBN 3-527-89613-9/1-56081-613-9

Der Titel des Buches ruft bei denjenigen, die halbwegs mit der Materie vertraut sind, unweigerlich die Reaktion: „Was denn, schon wieder ein Werk über Molecular Cloning Techniques?“ hervor. Es fallen einem nämlich sofort die etablierten Standardwerke zu dieser Thematik ein: Labormanuals wie der „Maniatis“ und die „Current Protocols“ und auch Enzyklopädien wie das „Gentechniklexikon“ – um nur die vielleicht bekanntesten zu nennen. Das vorliegende Buch paßt in keine dieser Kategorien. Vielmehr sollen, wie es im Umschlagtext heißt, „Studenten und Laboranten angesprochen werden, die sich mit Mikro- und Molekularbiologie, Genetik, Biotechnologie und Chemieingenieurwesen befassen“ – das Buch bietet also einen ersten Kontakt mit ausgewählten Problemen der Gentechnik und ist eine Mischung aus Lehrbuch und Praktikumsbuch. So enthält jedes der 23 Kapitel nach einer kurzen theoretischen Einführung einen Satz einfacher Experimente und Problemstellungen. Dabei beschränkt sich das gesamte Buch ausschließlich auf den gängigsten Wirtsorganismus, den Prokaryonten *Escherichia coli*, was insofern bemerkenswert ist, als mittlerweile in einem Gen-Labor ja durchaus noch eine Reihe weiterer „Haustiere“ wie Baculoviren und Hefen etablierter Standard sind. Der Rezensent ist jedoch der Ansicht, daß diese Beschränkung der Intention des Büchleins durchaus gerecht