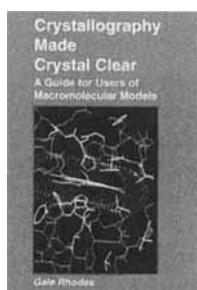


## Proteinkristallographie für Biochemiker

**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 Elektronendichte-Verteilungen 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 Diffraction 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 Rezessenten 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.