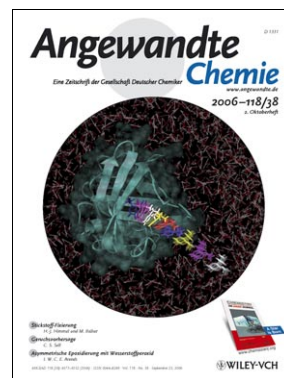


# Titelbild

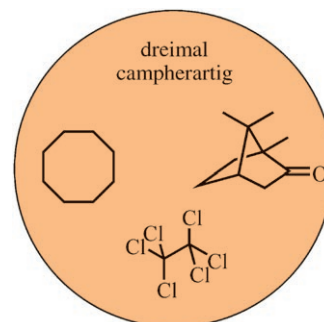
Natalia Shimokhina, Agnieszka Bronowska und Steve W. Homans\*

**Ligand-Protein-Wechselwirkungen** gehen mit der Desolvatation eines Liganden einher, während er in die Proteinbindetasche eintritt (siehe Titelbild). Homans et al. geben in ihrer Zuschrift auf S. 6522 ff. eine Abschätzung der thermodynamischen Kosten, die mit diesem Desolvatationsprozess verbunden sind. Mithilfe dieser Daten gelingt für die Wechselwirkung eines kleinen Moleküls mit dem Hauptharnprotein eine vollständige Aufschlüsselung der Bindungsthermodynamik in Liganden-, Protein- und Solvensbeiträge.



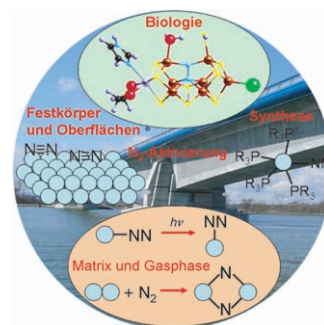
## Struktur und Geruch

In seinem Kurzaufsatz auf S. 6402 ff. erläutert C. S. Sell, warum die Vorhersage von Art, Intensität und Schwellenwert eines Geruchs anhand der Struktur eines Moleküls trotz unseres zunehmenden Wissens über den Mechanismus der Geruchswahrnehmung eine statistische Übung bleibt.



## Distickstoff-Aktivierung

Grundlegende Betrachtungen zur Wechselwirkung von Metallatomen mit Distickstoff sind das Thema des Aufsatzes von H.-J. Himmel und M. Reiher auf S. 6412 ff. Rechnungen geben Aufschluss darüber, in welchem Ausmaß  $N_2$  in diesen Komplexen aktiviert ist.



## Chemische Dynamik

Die Photodissoziation von  $[D_1]$ Benzolthiol liefert zwei Phenylthiylradikale, in denen das reaktive einfach besetzte Molekülorbital parallel bzw. senkrecht zur Molekülebene orientiert ist, wie S. K. Kim et al. in ihrer Zuschrift auf S. 6438 ff. berichten.

