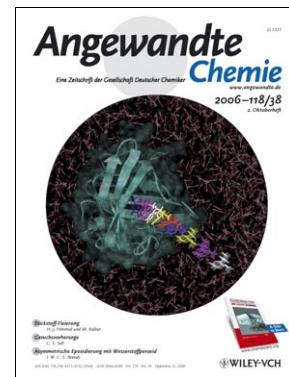


Titelbild

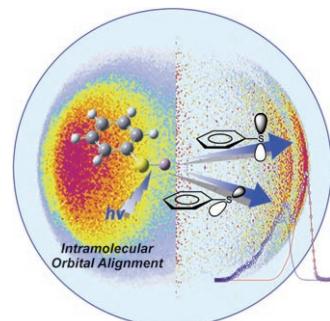
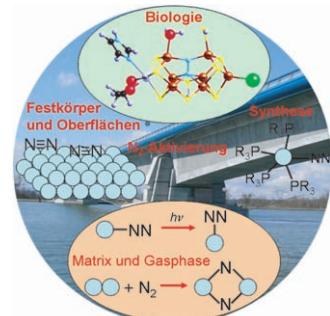
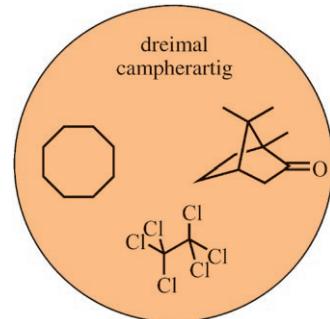
Natalia Shimokhina, Agnieszka Bronowska und Steve W. Homans*

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 Desolvationsprozess 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.