

Die beträchtlich größere Bindungslänge in 1 ist daher in Einklang mit der geringen Bindungsordnung.

Eingegangen am 9. November 1982 [Z 199]

[1] P. H. M. Budzelaar, J. Boersma, G. J. M. van der Kerk, A. L. Spek, A. J. M. Duisenberg, *Inorg. Chem.* 21 (1982) 3777.
[2] 2.2 g (11.3 mmol) Cp_2Zn werden bei Raumtemperatur zu einer Lösung von 1 g (3.64 mmol) $\text{Ni}(\text{cod})$, in 30 mL Benzol gegeben; unter Röhren wird innerhalb 1 h auf 70 °C erwärmt. Dabei entsteht eine dunkelgrüne

Lösung, aus der sich beim Abkühlen dunkelgrüne Kristalle abscheiden. Die Mutterlauge wird abgetrennt und der Rückstand mit heißem Cyclohexan gewaschen, um überschüssiges Cp_2Zn zu entfernen. Das so erhaltene Rohprodukt wird aus Benzol umkristallisiert. Ausb.: 0.93 g (67%); $\text{Fp} > 200$ °C.

[3] M. R. Churchill, S. A. Bezman, *Inorg. Chem.* 13 (1974) 1418.
[4] B. Lee, J. M. Burlitch, J. L. Hoard, *J. Am. Chem. Soc.* 89 (1967) 6362.
[5] Weitere Einzelheiten zur Kristallstrukturuntersuchung können beim Fachinformationszentrum Energie Physik Mathematik, D-7514 Eggenstein-Leopoldshafen, unter Angabe der Hinterlegungsnummer CSD 50328, der Autoren und des Zeitschriftenzitats angefordert werden.

NEUE BÜCHER

Elektronenstruktur organischer Moleküle. Grundbegriffe quantenchemischer Betrachtungsweisen. Von Martin Klessinger. Verlag Chemie, Weinheim 1982. XV, 331 S., geb. DM 78.00.

Das Buch von *M. Klessinger* ist der erste Band einer sechsteiligen Serie „Physikalische Organische Chemie“ und behandelt in neun Kapiteln (sowie in einem ausführlichen Anhang) gebräuchliche quantenchemische Modelle der theoretischen Organischen Chemie. Das erste Kapitel setzt sich mit dem Orbitalbegriff in atomaren und molekularen Systemen auseinander, im zweiten wird das HMO(Hückel-Molekül-Orbital)-Modell für einfache Systeme vorgestellt und im dritten wird eine knappe Einführung in gruppentheoretische Grundlagen und Symmetrien von Fermion-Systemen gegeben. Im vierten Kapitel werden Wechselwirkungen zwischen Orbitalen in einer Reihe von organischen Molekülen diskutiert und mit experimentellen Befunden (Photoelektronen-Spektroskopie) korrigiert. Die wichtigsten Aspekte von störungstheoretischen Ansätzen werden daran anschließend erörtert. Grundzüge von SCF(self-consistent-field)-Modellen und verschiedene Arten von Korrelationsdiagrammen (Orbital-Korrelationsdiagramme, Konfigurations- und Zustands-Diagramme) werden in den nächsten beiden Kapiteln vorgestellt. Abschließend werden wichtige MO-Modelle der theoretischen Chemie sowie quantenmechanische Hilfsmittel zur Analyse dieser Modelle (Populationsanalyse, Energiefragmentierung, Lokalisierungsverfahren usw.) behandelt.

Alle Kapitel sind didaktisch hervorragend aufgebaut; die thematischen Schwerpunkte werden jeweils in einer kurzen Einführung vorgestellt. Die Anforderungen an den Leser werden in jedem Abschnitt kontinuierlich gesteigert, ohne daß die Diskussion merkliche Lücken oder Sprünge aufweist. Die vielen Übungsaufgaben am Ende eines jeden Kapitels ermöglichen die stetige Kontrolle des verarbeiteten Textes. Dies dürfte den potentiellen Leserkreis über die theoretisch oder physikalisch interessierten Organiker hinaus erweitern. Die stoffliche Auswahl umfaßt auf der einen Seite quantenchemische Fundamentalprinzipien (Variationsverfahren, Störungstheorie, Hellmann-Feynman-Relation), bringt auf der anderen Seite nahezu vollständig alle wichtigen Modelle der angewandten theoretischen (Organischen) Chemie, die in den letzten 50 Jahren entwickelt worden sind. Viele Themenkreise werden dabei mit einer Intensität behandelt, die in vergleichbaren Lehrbüchern nicht zu finden ist. Besonders gelungen sind die Erläuterung der Korrelationstechniken (mit einer Vielzahl neuerer Literaturzitate), die Behandlung von Reaktionen im Grundzustand und photochemischen Reaktionen, eine Gegenüberstellung von MO- und VB-Resultaten bei reaktiven Systemen sowie eine Diskussion über verschiedene Typen von Reaktionshyperflächen. Die Gliederung des Buches ließe sich eventuell durch Kombination des sechsten und achten Kapitels noch übersichtlicher gestalten.

In jedem Fall läßt sich das vorliegende Lehrbuch einem weiten Leserkreis uneingeschränkt empfehlen. Der Aufbau des Buches, die graphischen Darstellungen sowie die Formelschemata zeichnen sich durch eine kaum zu übertreffende Sorgfalt aus. Dies erleichtert besonders die Verarbeitung der mathematischen und quantenmechanischen Gleichungen. Positiv zu bewerten ist auch der günstige Preis im Verhältnis zur Informationsbreite. Es ist zu wünschen, daß die folgenden Bände der „Physikalischen Organischen Chemie“ von vergleichbar hoher didaktischer Qualität sind und damit helfen werden, ein beträchtliches Informationsdefizit in der Chemie abzubauen. Mit dem Buch von *M. Klessinger* ist ein positiver Anfang gemacht, der hoffentlich eine breite Resonanz bei Lehrbuchsammlungen und privaten Bibliotheken findet.

Michael C. Böhm [NB 583]

Protein-Protein Interactions. Herausgegeben von C. Frieden und L. W. Nichol. John Wiley & Sons, New York 1981. 403 S., geb. £ 36.95.

Wechselwirkungen von Proteinen mit gleich- oder verschiedenartigen Proteinen oder Wechselwirkungen von Proteinen mit anderen Biopolymeren oder kleinen Liganden sind von zentraler Bedeutung für Funktion und Regulation biochemischer Prozesse. In den letzten zehn bis zwanzig Jahren sind Fortschritte sowohl experimenteller als auch konzeptioneller Art erzielt worden, die unser Verständnis von Wechselwirkungen in makromolekularen Systemen wesentlich erweitert und vertieft haben. Im hier besprochenen Buch behandeln elf namhafte Autoren die wichtigsten neueren Entwicklungen bis 1979/80.

Im einführenden Kapitel entwickelt und definiert *L. W. Nichol* allgemeine thermodynamische und kinetische Eigenschaften von Proteinsystemen. Ausgehend vom Verhalten eines nicht interagierenden Proteins in Lösung werden Wechselwirkungen gleicher Moleküle und heterologe Wechselwirkungen sowie Zwei- und Mehrkomponentensysteme behandelt.

Im zweiten Kapitel besprechen *L. J. Banaszak, J. J. Birktoft* und *C. D. Barry* im Detail strukturelle und energetische Aspekte von Protein-Protein-Wechselwirkungen. Die in die Tiefe gehende, kritische Behandlung von Experiment und Theorie der Strukturanalyse von Biopolymeren, der interatomaren Kräfte und der Voraussage der Konformation machen dieses Essay zu einem Höhepunkt des Buches. Da die Autoren Kristallographen sind, legen sie das Hauptgewicht auf Röntgen-Kristallographie. Die Bearbeitung der Hierarchie der Proteinstrukturen ist auf modernstem Stand: Super-Sekundärstrukturen, Domänen, symmetrische und nichtsymmetrische Assoziate etc. werden besprochen. In einem Anhang sind Energieminimierung, empirische Strukturvorhersage, Monte-Carlo-Berechnungen, Umgebungseffekte, molekulare Dynamik und Proteininfaltung etc. berücksichtigt.

D. J. Winzor gibt einen ausgezeichneten Überblick über den derzeitigen Stand von Theorie und Praxis der Sedimentationsgeschwindigkeits-, Gelchromatographie-, Elektrophorese-Methoden etc. Reversibel selbstassozierende Systeme werden ebenso behandelt wie Assoziations-Dissoziations-Gleichgewichte heterogener Systeme. Die Betrachtung beschränkt sich nicht auf Protein-Protein-Wechselwirkungen, sie schließt auch Protein-Liganden-Wechselwirkungen im weiteren Sinne ein. So werden Monomer-Oligomer-Gleichgewichte und deren Beeinflussung durch exklusive oder bevorzugte Bindung von Substraten (Reaktanden) und allosterischen Effekten an Monomer oder Oligomer besprochen. Diese Vorgänge sind für die Regulation von Enzymen, für Genexpression, Hormonwirkungen, Immunantwort etc. von Bedeutung.

In einem separaten Kapitel geben *D. J. Cox* und *R. S. Dale* eine Einführung in die „Boundary“-Analyse. Von den verfügbaren Simulationsmethoden werden „Distorted grid simulation“ (Cox) und „Finite element simulation“ (Claverie) ausgesucht, die als besonders effektiv angesehen werden. *P. D. Jeffrey* beschreibt klassische Gleichgewichtsmethoden für die Bestimmung der Stöchiometrie und der Gleichgewichtskonstanten von wechselwirkenden Makromolekülen. In eindrucksvoll präziser Weise werden zunächst thermodynamisch nicht ideale homogene und heterogene Multikomponentensysteme formal beschrieben und dann Protein-Protein-Wechselwirkungen auf der Basis zweiter und höherer Virialkoeffizienten und der Adams-Fujita-Methode interpretiert.

G. G. Hammes beschreibt Fluoreszenzmethoden. Das Hauptgewicht liegt auf Resonanzenergie-Transfer, und als Beispiele werden Antikörper-Reaktionen und des Autors eigene Arbeiten mit „Chloroplast-Coupling Factor“ angeführt. Schließlich wird die Messung von Abständen von Proteinen an Zelloberflächen anhand des Energietransfers kurz eingeführt.

Die Kinetik assoziierender-dissoziierender Enzymsysteme wird eingehend von *C. Frieden* behandelt, der selbst wesentliche Beiträge zur kinetischen Behandlung allosterischer Enzyme geleistet und den Begriff des „hysteretischen“ Enzyms entwickelt hat. *Frieden* plädiert für sorgfältigen Vergleich von kinetischen Daten und von Daten aus Bindungsmessungen unter Bedingungen, bei denen Enzym, Substrat und Enzym-Substrat-Komplex im Gleichgewicht sind. *Friedens* kritische Behandlung der Beziehung von Aktivität und Konzentration eines Enzyms ist meisterhaft. Es wurden Computerprogramme zur Auswertung kinetischer Daten durch numerische Integration zur Lösung von Differentialgleichungen entwickelt. Auf die Bedeutung von Geschwindigkeitsmessungen bei der Einstellung von Monomer-Polymer-Gleichgewichten wird hingewiesen, und Methoden zum Vergleich von Molekulargewicht und Aktivität eines Enzyms werden diskutiert. Wechselwirkungen von Enzymen mit anderen Proteinen (mit und ohne enzymatische Funktion) und mit zellulären Strukturen (z. B. Membranen, Cytoskelett und Nucleinsäuren) werden berücksichtigt, und der Modellcharakter immobilisierter Enzyme und gekoppelter Enzymreaktionsketten wird betont. Im Hinblick auf die physiologische Bedeutung von Assoziations-Dissoziations-Reaktionen von Enzymen, die drastisch die kinetischen und regulatorischen Eigenschaften beeinflussen, falls Monomer und Polymer unterschiedliche kinetische Eigenschaften haben, sollte *Friedens* Beitrag allen Enzymologen, die sich mit der Regulation enzymatischer Prozesse befassen, die Anschaffung dieses Buches nahelegen.

In Kapitel 9 beschäftigen sich *L. W. Nichol* und *D. J. Winzor* nochmals eingehend mit Ligandenbindung. Uns

scheint allerdings dieser Aufwand nicht notwendig: Zwar basiert die Besprechung experimenteller Methoden auf einer soliden theoretischen Einführung, und diese enthält auch nützliche Hinweise für den Experimentator, doch sind die wichtigsten Aspekte bereits an anderen Stellen veröffentlicht worden. Leider entspricht die Behandlung einiger spezieller Probleme nicht dem heutigen Stand der Forschung. Hingegen legt das Kapitel über die Polymerisation von Tubulin ein eindrucksvolles Zeugnis für den Wert dieses Buches ab. *S. N. Timasheff* entwickelt mit prägnanter Klarheit Theorien linearer und von einem Keimzentrum sich ausbreitender „nucleated“ Polymerisation von Proteinen auf der Grundlage von *Oosawas* Theorie der helicalen Polymerisation von Actin. Besonders wertvoll sind *Timasheffs* Anmerkungen zur Methodik: Aus einem reichen eigenen Erfahrungsschatz schöpfend, werden die Vorteile, aber auch die Grenzen der Lichtstreuungs-, Viskositäts- und Zentrifugierungsmethoden für die Analyse polymerisierender Proteine aufgezeigt.

Dieses Buch wurde nicht für Studenten geschrieben. Es richtet sich an den Forscher, der sich mit der physikalischen Analyse der Wechselwirkungen von Proteinen und Enzymen befasst. Für diesen Kreis von Biochemikern, Enzymologen und Molekularbiologen wird das Buch von großem Nutzen sein. Wir wüßten kaum eine neuere Monographie zu nennen, die für diesen Interessentenkreis von vergleichbar großem praktischem Nutzen ist. In den meisten Fällen werden Theorie, Anwendung von Methoden in der Praxis und kritische Analyse der Meßergebnisse so eingehend und gründlich behandelt, daß sich das Studium der Originalliteratur erübrigt. Trotzdem ist das Buch nicht ohne Mängel: Einerseits gibt es Wiederholungen, die sich hätten vermeiden lassen; in manchen Fällen hat die Begeisterung die Autoren veranlaßt, spezielle Probleme überzubewerten und zu eingehend zu behandeln. Andererseits gibt es auch schwer verständliche Unterlassungen; so wurden Methoden der Elementarschritt-Kinetik vernachlässigt. Aber trotz aller Kritik möchten wir dieses Buch ohne Vorbehalt all denen empfehlen, die in ihrer Forschung Protein-Protein-Wechselwirkungen berücksichtigen müssen – und das sollten viele sein; denn welcher Biochemiker wird sich nicht mit solchen Prozessen auseinandersetzen müssen, die von so grundsätzlicher Bedeutung für das Verständnis von Struktur, Funktion und Regulation von Proteinen und Enzymen in vitro und in der lebenden Zelle sind.

Rainer Jaenike und Ernst J. M. Helmreich [NB 578]

Neuerscheinungen

Die im folgenden angezeigten Bücher sind der Redaktion zugesandt worden. Nur für einen Teil dieser Werke können Rezensionen erscheinen, da die Seitenzahl, die dafür zur Verfügung steht, begrenzt ist. Alle aufgeführten Werke können über W & P Buchversand für Wissenschaft und Praxis, Boschstraße 12, D-6940 Weinheim, bezogen werden. Tel. (06201) 606-0, Telex 465 516 vchwh d, Telefax (06201) 602 328.

Anorganische Chemie. Eine zusammenfassende Darstellung für Fortgeschrittene. 4., völlig neu bearbeitete Auflage. Von *F. A. Cotton* und *G. Wilkinson*. Verlag Chemie, Weinheim 1982. XII, 1420 S., geb. DM 108.00. – ISBN 3-527-25903-1