

**Crystallographic Methods and Protocols.** Vol. 56 in *Methods in Molecular Biology*. Herausgegeben von C. Jones, B. Mulloy und M. R. Sanderson. Humana Press, Clifton, 1996. 394 S., Loose-Leaf-Edition 69.50 \$.—ISBN 0-896-03259-0

Das vorliegende Buch wurde als „Rezeptbuch“ für Protein-Kristallographen herausgegeben. Es beschreibt die Praxis, wie sie sonst nicht in Lehrbüchern zu finden ist. Die Verfahren der Kryokristallographie, die immer wichtiger werden, sind im Detail beschrieben und es ist ausgeführt, wie die verschiedenen, heute gebräuchlichen Flächenzähler installiert und benutzt werden. Weiterhin sind Computerprogramme aufgeführt, die zur Auswertung von Röntgendiffraktionsdaten und zur Bestimmung und Verfeinerung von Protein-Kristallstrukturen allgemein verwendet werden. Dies sind Informationen, die sonst nur in den spezifischen Handbüchern für die entsprechende Soft- und Hardware mitgeliefert werden, die aber wichtig sind für Auswahl und Kauf der entsprechenden Geräte. Es werden Strategien zur Ermittlung der Lagen von Schweratomen besprochen, die für die Phasenbestimmung wesentlich sind sowie Protokolle für die Verfeinerung einer gelösten Struktur. All diese „Rezepte“ sind so einleuchtend beschrieben, daß auch der molekularbiologisch oder biochemisch ausgebildete, an Strukturbiologie interessierte Leser sich rasch in die entsprechenden Methoden einarbeiten kann. Das Buch schließt mit Verfahren zur Kristallisation von Oligonucleotiden, Protein-DNA-Komplexen, Viren und Membranproteinen.

Der Inhalt des Buchs ist klar gegliedert und die Verfasser der einzelnen Kapitel sind international anerkannte Experten. In dem Kapitel *Introduction* werden die Grundlagen der Proteinkristallographie kurz dargestellt, in *Overexpression, Isolation and Crystallization of Proteins* wird die Produktion von Proteinen in prokaryontischen und eukaryontischen Überexpressionssystemen vorgestellt sowie ihre Isolierung und Reinigung beschrieben, wobei auch die Hersteller der verschiedenen angewendeten Geräte genannt sind. Anschließend werden Kristallisationsstrategien beschrieben, z.B. wie durch „Screening“ Kristalle erhalten und durch Impfen verbessert werden können. In *Preliminary Characterization of Crystals* werden die Kristallsymmetrien eingeführt, die „Montage“ von Kristallen in Kapillaren sowie die für die Kryokristallographie wesentliche Schock-Gefrierung beschrieben. Es geht weiter mit der Aufnahme und

Auswertung von Präzessions-Aufnahmen, zur Bestimmung von Raumgruppen und Zellkonstanten der Kristalle. *Modern Methods for Rapid X-Ray Diffraction Data Collection from Crystals of Macromolecules* stellt die heute üblichen Flächenzähler vor; ihre Anwendung ist in sehr übersichtlicher Weise beschrieben, und die Auswertung und Reduzierung der Daten wird im Detail angegeben. Hier wird noch einmal das Thema der Kryokristallographie aufgegriffen. In *Use of Multiple Wavelength Anomalous Diffraction (MAD) Measurements in ab initio Phase Determination for Macromolecular Structures* wird die Theorie der anomalen Dispersion vorgestellt und die Messung der Daten mit verschiedenen Wellenlängen (am Synchrotron) sowie die Auswertung der Daten bis hin zur Bestimmung der Phasenwinkel beschrieben. *Structure Determination using Isomorphous Replacement* beginnt mit der Darstellung von Schweratom-Derivaten, erläutert die Bestimmung der Schweratomlagen mittels Patterson-Methoden und endet mit der Verfeinerung dieser Lagen. Hier werden auch die verschiedenen Kriterien wie „Figure of Merit“, „Cullis R-Factor“, „Lack of Closure Error“ sowie die Anwendung von Differenz-Patterson- und Differenz-Fourier-Methoden besprochen. In *Molecular Replacement Using Known Structural Data* begegnen wir den Methoden des molekularen Ersatzes, die wegen der ständig wachsenden Proteindatenbank immer wichtiger werden. Auch hier werden wieder in übersichtlicher Weise die verschiedenen Programme und ihre Arbeitsweisen mit einigen praktischen Anwendungen vorgestellt, die für Rotations- und Translations-Verfahren wichtig sind. *Density Modification in X-Ray Crystallography* beschreibt die wirksamen Methoden, die zur Verbesserung der anfänglich erhaltenen Elektronendichte-Verteilung führen, so daß deren Interpretation mit Modellen erleichtert wird. In *Refinement of Protein and Nucleic Acids Structures* werden die zur Zeit verwendeten Programme aufgeführt, ihre Anwendung beschrieben und Protokolle ausgearbeitet, wie man sinnvollerweise bei der Verfeinerung dieser Strukturen vorgehen sollte. Weiter werden Verfahren zum ersten manuellen Bau und der späteren Verbesserung von Modellen angegeben, die alternierend mit Verfeinerungsläufen Anwendung finden. Schließlich wird auf die Qualitätskriterien für ein Strukturmodell, wie R-Faktor und Freier-R-Faktor verwiesen. Diese Themen werden in *Recent Developments for Crystallographic Refinement of Macromolecules* mit der Beschreibung der Methoden und der An-

wendung von „simulated annealing“ vertieft.

Die nächsten vier Kapitel beschäftigen sich mit Methoden der Kristallisation und Strukturanalyse von Oligonucleotiden, Protein-DNA Komplexen, Viren und Membranproteinen. Diese Kapitel erweitern die am Beginn des Buches beschriebenen Kristallisationsprotokolle für Proteine. Vor allem wichtig erscheint mir, daß die bisher erfolgreichen Protokolle für die Kristallisation von Oligonucleotiden, Protein-DNA-Komplexen und Viren tabellarisch aufgeführt sind. Weiterhin wird auf spezifische Probleme bei der Kristallisation, Messung, Auswertung der Daten und der Strukturbestimmung für diese Moleküle hingewiesen, mit besonderer Betonung der nicht-kristallographischen Symmetrie und der Phasenerweiterung bei Virus-Strukturanalysen. Das letzte Kapitel beschreibt die zweidimensionale Kristallisation von Membranproteinen und es wird auch auf die entsprechende Literatur zur Züchtung von dreidimensionalen Kristallen verwiesen, so daß sich der interessierte Leser gut einarbeiten kann. Eine zusätzliche Liste der üblicherweise verwendeten Detergentien wäre hier sinnvoll gewesen.

Dieses Buch füllt eine Lücke in der bisherigen Literatur über Proteinkristallographie, da es nur knapp auf die theoretischen Grundlagen eingeht und das Hauptgewicht auf Protokolle legt, anhand derer Protein-Kristallstrukturanalysen in der Praxis durchgeführt werden. Es ist nicht nur für den Biochemiker und Molekularbiologen zu empfehlen, der die Arbeitsweisen der Proteinkristallographie lernen und anwenden möchte, sondern es gibt auch eine sehr gute Übersicht für den schon erfahrenen Protein-Kristallographen, der hier viele wertvolle Anregungen für seine Arbeit findet. In diesem Sinn habe ich gleich drei Exemplare dieses Buchs für meine Arbeitsgruppe bestellt.

Wolfram Saenger  
Institut für Kristallographie  
der Freien Universität Berlin

**To See the Obvious.** (Reihe: Profiles, Pathways, and Dreams. Hrsg.: J. I. Seeman) Von A. J. Birch. American Chemical Society, Washington, D.C., 1995. XXVIII, 269 S., geb. 24.95 \$.—ISBN 0-8412-1840-4

Der Prozeß zur teilweisen Dehydrierung von aromatischen Verbindungen unter Verwendung eines Metalls (gewöhnlich Natrium) und absolutem Ethanol in flüssigem Ammoniak – erstmals genannt