

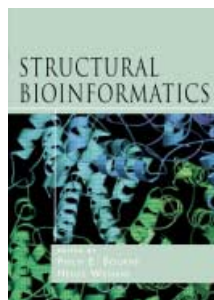
Agentien wie Endiine, Ecteinascidine, Azinomycine und Pyrrolbenzodiazepine behandelt, die an DNA anlagern.

Es war das Ziel der Herausgeber, dem Leser einen Überblick über den derzeitigen Forschungsstand auf dem Gebiet der Nucleinsäure-Wirkstoff-Wechselwirkungen zu geben, wobei die wichtigsten Wirkstoffklassen berücksichtigt werden sollten. Dies ist sehr gut gelungen, obwohl meines Erachtens die Darstellung der Kohlenhydrat-Nucleinsäure-Wechselwirkungen im Besonderen und der Wechselwirkungen mit RNA im Allgemeinen etwas knapp ausgefallen ist. Dennoch ist es den Herausgebern gelungen, eine wertvolle Sammlung interessanter und nützlicher Beiträge zusammenzustellen, die das Gebiet aus verschiedenen Blickwinkeln, einschließlich der Chemie, Biophysik und Pharmakologie, beleuchten. Ich bin glücklich, dieses Werk in meiner Bibliothek zu haben.

Oliver Seitz

Max-Planck-Institut für molekulare Physiologie
Dortmund

Structural Bioinformatics



Herausgegeben
von Philip E. Bourne
und Helge Weissig.
John Wiley & Sons,
Hoboken 2003.
649 S., Boschur,
165.00 €.—ISBN
0-471-20200-2

Was ist Bioinformatik? Diese im ersten Kapitel des von Philip E. Bourne und Helge Weissig herausgegebenen Multiautorenbuches *Structural Bioinformatics* gestellte Frage ist alles andere als trivial, zumal der Begriff erst um 1987 von Hwa A. Lim in der frankophonen Sprechweise „Bioinformatique“ ins Spiel gebracht wurde. Unter dem Eindruck der „Large-Scale“-Genomsequenzierungsprojekte verstehen viele

Biowissenschaftler mittlerweile unter Bioinformatik immer noch gängige Prozeduren wie Sequenzanalyse, -vergleich und -annotation; also all das, was man in der Informatik spöttisch als elementare Zeichenkettenoperationen zusammenfassen könnte. *Structural Bioinformatics* räumt mit diesem Scheuklappenblick auf die Bioinformatik auf. Als eine Sammlung von Übersichtsartikeln über die vielen Facetten der Bioinformatik, die sich mit den 3D-Strukturen biologischer Makromoleküle befassen, richtet es sich vor allem an strukturbioologisch interessierte Biochemiker und Molekularbiologen.

In den Kapiteln 2–7 werden die Grundlagen der Strukturen biologischer Makromoleküle sowie der Methoden zu ihrer Aufklärung vermittelt. Besonders nützlich ist das ausgezeichnete Kapitel über Nucleinsäurestrukturen, das weit über übliche Lehrbuchdarstellungen hinausgeht, in denen nur A-, B- und Z-Helix vorgestellt werden. Leider ist dagegen das Kapitel über die informationstechnischen Aspekte der kristallographischen Strukturanalyse recht schwach, weil es profunde Kenntnisse der Proteinkristallographie voraussetzt, die bei einem solchen Buch nicht erforderlich sein sollten. Die folgenden Kapitel über NMR-Spektroskopie und Elektronenmikroskopie sind weitaus besser gelungen, da die Autoren hier experimentelle Besonderheiten der jeweiligen Methoden für den Laien hervorheben. Nach einigen eher technisch orientierten Kapiteln über Formate und Strukturen der 3D-Strukturinformationen beinhaltenden Datenbanken folgen in der zweiten Hälfte des Buches hervorragende Abschnitte über Strukturvergleiche, Proteinklassifikationen (SCOP, CATH), die Qualitätskontrolle von Proteinstrukturen und Homologiemodellierung. Diese Kapitel machen den eigentlichen Wert dieses Buches aus, da anerkannte Experten zumeist sehr aktuelle, in die Tiefe gehende Übersichten geliefert haben, die durch viele Literaturhinweise bereichert wurden.

Nach der Lektüre dieses Buches kann man sich nicht ganz dem Eindruck entziehen, dass „neue Kleider Leute machen“. Was als „Structural Bioinformatics“ manchmal etwas hochtrabend eine neue Herangehensweise an die Analyse der Proteinstruktur und ihre

Beziehung zur biologischen Funktion suggeriert, war unter Proteinkristallographen und Bio-NMR-Spektroskopikern oft schon Allgemeingut, lange bevor es den Fachausdruck „Bioinformatik“ überhaupt gab. Dennoch ist mir eine Zusammenstellung wie in *Structural Bioinformatics* weder in anderen Bioinformatik-Lehrbüchern noch in strukturbioologischen Kompendien begegnet. Von besonderem aktuellem Interesse wären die bioinformatischen Probleme der Strukturgenomik gewesen, die leider nur kurz im letzten Kapitel gestreift werden. Allerdings fällt es schwer, alle im raschen Umbruch befindlichen Teilgebiete in Buchform aktuell zu erfassen. Was diesem Buch fehlt, um es auch als Lehrbuch einsetzen zu können, ist ein mehr didaktischer Fokus. Algorithmen oder Basiskonzepte fehlen in vielen Kapiteln oder sind nur unzureichend eingeführt. So wird beispielsweise „Threading“, eine Technik zur Erkennung von Proteinfaltungsmotiven und zur Validierung von Modellstrukturen, auf Seite 533 in Form einer Vielzahl von Literaturziten eingeführt, ohne dass der unerfahrene Leser die Kernidee dieser Methode, die Entwicklung und Verwendung stark vereinfachter, empirischer Kraftfelder, zuvor vermittelt bekommt. Vorteilhaft für den Nachschlagewert dieses Buches wäre ein gemeinsamer Anhang gewesen, der die besprochene Software, Internetadressen und andere Quellen mit Bezug auf die jeweiligen Kapitel und nach Themengebieten sortiert auflistet.

Dessen ungeachtet gehört dieses sehr gute Buch in das Regal eines jeden strukturbioologisch interessierten Biochemikers oder Bioinformatikers: Ersteren erspart es die Mühe, brandaktuelle Übersichtsartikel über spezielle Gebiete wie Proteinklassifikation, -qualitätskontrolle usw. zusammenzusuchen, während viele Bioinformatiker durch eine Erweiterung ihrer oft auf eindimensionale Sequenzen beschränkten Perspektive auf die fantastische 3D-Welt der Proteine Inspiration finden werden.

Lars-Oliver Essen

Fachbereich Chemie
Universität Marburg

DOI: 10.1002/ange.200385018