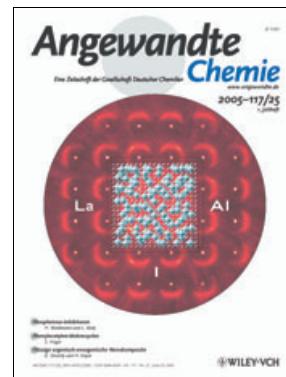


Titelbild

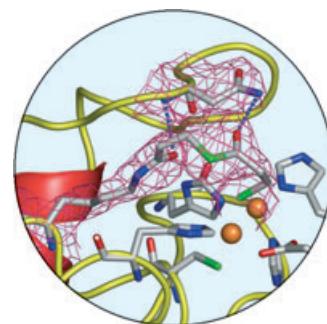
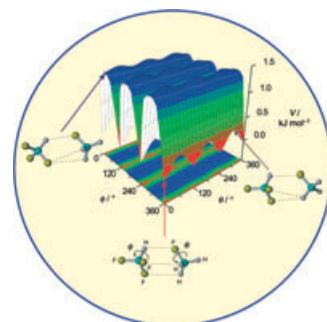
Oliver Oeckler, Thomas Weber, Lorenz Kienle, Hansjürgen Mattausch und Arndt Simon*

Diffuse Beugungsdaten von fehlgeordneten Verbindungen können dank neuer numerischer Algorithmen immer besser interpretiert werden, eine quantitative Strukturverfeinerung unter Einbeziehung aller Beugungsdaten, also nicht nur der Bragg-Reflexe, gelang bisher aber nur in wenigen Fällen. Am Beispiel eines aluminiumstabilisierten Lanthansubiodids wird auf S. 3985 ff. die Verwendung evolutionärer Verfeinerungsalgorithmen demonstriert. Das Titelbild zeigt im Hintergrund ein Beugungsbild der Verbindung, in der Mitte davor ist ein Ausschnitt des fehlgeordneten Strukturmodells zu sehen.



Medizinische Chemie

Proteintryrosinphosphatasen werden seit einigen Jahren als Angriffspunkte therapeutischer Eingriffe untersucht. Jüngste Forschungsaktivitäten zur Entwicklung niedermolekularer Inhibitoren dieser Enzyme diskutieren H. Waldmann und L. Bialy im Aufsatz auf S. 3880 ff.



Moleküldynamik

Molekülcluster, die durch Wasserstoffbrücken zusammengehalten werden, können hochdynamische Systeme sein. W. Caminati et al. zeigen dies in ihrer Zuschrift auf S. 3908 ff. für einen Fluormethan-Trifluormethan-Komplex.

Bioorganische Chemie

Pathogene Bakterien, die Metallo-β-lactamasen produzieren, gelten wegen ihrer Resistenz gegen Antibiotika als große Gefahr. In ihrer Zuschrift auf S. 3929 ff. stellen H. Kurosaki et al. einen irreversiblen Inhibitor der Metallo-β-lactamase IMP-1 vor, der kovalent an das Enzym bindet.