

VRML für molekulare Strukturen

Die Virtual Reality Modeling Language (VRML) ist ein neues durch Netzwerkfunktionalität ergänztes dreidimensionales Bildformat. Möglichkeiten und Grenzen dieser Entwicklung werden insbesondere im Hinblick auf strukturbiochemische Aspekte beschrieben.

Die Visualisierung komplexer molekularer Strukturen ist eine unverzichtbare Voraussetzung für ihr Verständnis. Das trifft in besonderer Weise auf biologische Makromoleküle zu.¹⁾ Der in den Anfangstagen der Strukturbiologie übliche Modellbau mit Metall und Kunststoff ist seit Anfang der 80er Jahre durch die Computergraphik abgelöst worden. Eine Vielzahl von Techniken ermöglicht die Erzeugung visueller Informationen, die vom Cartoon-ähnlichen Eindruck von einer Gesamtstruktur bis zu den subtilsten Details spezieller Wechselwirkungen einzelner Bausteine reichen können. Der übliche Weg zur Visualisierung besteht darin, die Atom-Koordinaten einer Struktur aus einer Datenbank auf den lokalen Rechner zu laden und dann eine spezielle Molekülgraphik-Software zu verwenden. Dreidimensionale Informationen über Biopolymer-Strukturen werden in der Protein-Datenbank (PDB) am Brookhaven National Laboratory und in der Nukleinsäuredatenbank an der Rutgers University gesammelt, wobei die Protein-Datenbank auch Nukleinsäure-Strukturen enthält.^{w47, w48)} Gegenwärtig beobachtet man eine explosionsartige Zunahme neuer Strukturen. Anfang Februar 1998 waren in der Protein-Datenbank 7081 Einträge verfügbar (6584 Proteine, 521 Nukleinsäuren und 12 Kohlehydrate). 1997 wurden 1640 neue Strukturen freigegeben, was einer Wachstumsgeschwindigkeit von mehr als vier neuen Strukturen pro Tag entspricht.

Die Internet-Bildbibliothek biologischer Makromoleküle

Für eine intensive Beschäftigung mit Biopolymer-Strukturen ist die Verwendung einer lokal verfügbaren Molekülgraphik-Software die Methode der Wahl. Andererseits würde man in vielen Fällen gern einen direkten Zugang zu visuellen Informationen über Biopolymer-Strukturen haben, ohne selbst die Zeit zur Erzeugung der Molekülgraphik aufwenden zu müssen oder eine Molekülgraphik-Software zur Verfügung zu haben. Das ist insbesondere wichtig für Interessenten außerhalb der eigentlichen Strukturbiologie. Kürzlich wurde beispielsweise auf einer Genomtagung festgestellt, daß der Einfluß der gegenwärtig bereits verfügbaren dreidimensionalen Informationen über Biopolymerstrukturen im Bereich der Genomforschung eher gering ist.²⁾ Es gibt deshalb einen erheblichen Bedarf an einer besseren Vermittlung dieser Informationen.

Mit den neuen Entwicklungen im Internet oder World-Wide Web (WWW) ist es sehr leicht geworden, Bild-Informationen über das Netz zu übertragen. Wir haben deshalb bereits 1993 begonnen, eine über das Internet frei zugängliche Bildbibliothek biologischer Makromoleküle aufzubauen.^{3-5, w36)} Gegenwärtig enthält diese Datenbank mehr als 4000 Bildfiles von etwas mehr als 350 Protein- und Nukleinsäure-Strukturen, darunter nahezu alle der gegenwärtig bekannten RNA-Strukturen. Darüber hinaus ist eine Vielzahl von Informationen über Biopolymer-Bausteine wie Aminosäuren, Nukleotide und Sekundärstrukturelemente zugänglich. 1995 wurde begonnen, die bis dahin statischen Abbildungen im Mono- und Stereo-Format durch VRML-Darstellungen zu ergänzen. Das war neben der durch die Gruppen von H. Rzepa am Imperial College London und von J. Brickmann an der Technischen Universität Darmstadt geleisteten Pionierarbeit weltweit eine der ersten VRML-Applikationen in der Biologie und wohl die erste nicht ausschließlich Demonstrationszwecken dienende Anwendung.^{6-8, w35, w44)} Inzwischen enthält die Bildbibliothek mehr als 600 VRML-Darstellungen. Ein Beispiel ist in Abbildung 1 gezeigt. Wir sind auf diese Weise in der Lage,

uns ein Urteil zu bilden, das über die in der Regel in anderen VRML-Beiträgen übliche Beschreibung von prototypischen Einzelbeispielen hinausgeht.

Was ist VRML ?

VRML ist eine plattformunabhängige mit Netzwerkfunktionalität ergänzte Standardsprache zur Beschreibung dreidimensionaler Objekte.^{w6,w7)} Mit einer geeigneten Betrachtungs-Software kann man auf diese Weise mit molekularen Strukturen oder anderen dreidimensionalen (3D) Objekten interagieren, und zwar geometrisch (Rotation, Translation, Zoom) und hierarchisch (Laden neuer Informationen). VRML beruht auf dem Open Inventor ASCII Dateiformat von Silicon Graphics und beschreibt 3D-Objekte oder -szenarien in objektorientierter Weise.^{w5)} Die Grundelemente von VRML sind sogenannte Knotentypen und Kommunikationswege: Gestaltknoten (Punkte, Zylinder, Kugeln, Zylinder), Eigenschaftsknoten (Farbe, Texturen, geometrische Transformationen), Lichtknoten, Kameraknoten (parallele, perspektivische Projektion) und Gruppenknoten zur Implementierung hierarchischer Strukturen, sowie Prototypen zur Erweiterung der vorhandenen Knotentypen um selbstdefinierte (Abbildung 2). Die WWWInline-Knoten ermöglichen das Laden anderer VRML-Files in das jeweilige Szenario und WWWAnchor-Knoten die Aktivierung von Verbindungen zu anderen Informationsquellen (Hyperlinks). Die Knoten können durch sogenannte Ereignismeldungen miteinander interagieren, die entlang definierter Kommunikationswege weitergeleitet werden. Schöne Beispiele für einfache Objekte und die dazugehörigen VRML-Dateien sind in einer Zusammenstellung von chemisch relevanten VRML-Informationen aus Bristol zu finden.^{w43)}

Die Idee für VRML entstand 1994 während der ersten World-Wide-Web-Konferenz in Genf. Während einer heißen Phase wurden mit einer weltweiten VRML-Mailing-Liste Grundzüge des neuen Bildformats vereinbart und im Mai 1995 stand dann die erste frei verfügbare VRML-Betrachtungssoftware aus dem kommerziellen Bereich, WebSpace von Silicon Graphics, für die ersten Plattformen zur Verfügung. Die ursprüngliche VRML-1.0-Spezifikation ist inzwischen zu VRML 2.0 erweitert worden, wodurch dynamisches Verhalten und mehr Interaktivität ermöglicht werden. Weitere Informationen über praktisch alle Aspekte von VRML kann man über das VRML Repository des San Diego Supercomputer Center erhalten.^{w7)}

Die folgende Diskussion bezieht sich ausschließlich auf VRML-Darstellungen an einem Computer-Bildschirm und beschäftigt sich nicht mit der Visualisierung dreidimensionaler molekularer Strukturen im Raum.¹⁰⁾

Wie kann man VRML-Repräsentationen erzeugen und betrachten ?

Für die Erzeugung von VRML-Darstellungen benötigt man eine Software, die Informationen über die molekulare Struktur in das VRML-Format umwandelt. Das kann entweder über ein Molekülgraphik-Programm oder direkt erfolgen. Wir haben für die Bildbibliothek biologischer Makromoleküle ursprünglich die EyeChem-Module von Omer Casher und das MidasPlus-Programm verwendet.^{6,11)} Beide Programme konnten Dateien im Open-Inventor-Format erzeugen, die dann mit Hilfe des Konvertierungsprogramms ivToVRML von Silicon Graphics in das VRML-Format umgewandelt wurden. Gegenwärtig erzeugen wir nahezu alle VRML-Repräsentationen mit den Programmen InsightII und WebLab von Molecular Simulations, Inc., wobei InsightII eine teure kommerzielle Software ist und WebLab, zumindest in der Lite-Version, kostenfrei erhältlich ist.^{w23,w24)} Weitere Programme sind am Ende des Beitrags zusammengestellt. Eine andere Möglichkeit besteht in der direkten Umwandlung einer Datei mit Strukturdaten in VRML. Beispiel hierfür sind das in Darmstadt entwickelte Konvertierungsprogramm pdb2vrml und der VRML Generation Service aus Erlangen.^{w16,w25)} Es liegt auf der Hand, daß Programme dieses Typs nur eingeschränkte

Visualisierungsmöglichkeiten haben. Wir möchten deshalb Entwickler von Molekülgraphik-Software ermuntern, VRML-Schnittstellen zu integrieren, um damit die oft jahrelangen Bemühungen um ausgefeilte Visualisierungstechniken auch in die VRML-Welt übertragen zu können.

Zur Betrachtung von VRML-Darstellungen benötigt man eine geeignete Visualisierungs-Software (Viewer). Weospace, der erste frei verfügbare VRML-Viewer aus dem kommerziellen Bereich, wurde im Mai 1995 freigegeben. Heute gehören VRML-fähige Komponenten (Plugins) zur Standard-Ausrüstung der meistverwendeten Netznavigatoren (Browser) Netscape Navigator und Microsoft Internet Explorer.^{w1,w2,w10,w11} Besonders interessant für strukturbiochemische Aspekte ist die am europäischen Kernforschungszentrum CERN in Genf entwickelte Software i3D, weil sie es erlaubt VRML-Files in einer Hardware-Stereo-Darstellung zu betrachten.^{w8} CosmoPlayer von Silicon Graphics war einer der ersten Viewer, der die VRML-2.0-Spezifikation unterstützt.^{w9}

Anwendungsmöglichkeiten und Probleme

Bei der Beurteilung der durch VRML geschaffenen Möglichkeiten bemühen wir uns um ein Urteil aus der Sicht des Anwenders, der die Euphorie der Entwickler versteht und für nützlich hält, sie aber nicht ungeteilt übernimmt. Wir können dabei auf Erfahrungen mit der großen Zahl von VRML-Darstellungen in unserer Internet-Bilddatenbank zurückgreifen. Vor einer eher grundsätzlichen Diskussion über die Möglichkeiten von VRML müssen zunächst zwei praktische Aspekte angesprochen werden. Es wird gelegentlich darauf hingewiesen, daß VRML-Dateien verglichen mit analogen Darstellungen in üblichen Bildformaten, wie GIF, BMP oder JPEG, klein sind.^{7,8} Das trifft für kleine Moleküle auch durchaus zu. Für qualitative hochwertige Darstellungen großer Biopolymerstrukturen aber ist das Gegenteil der Fall.⁵ Hier ist es problemlos möglich, VRML-Dateien einer Größe von 50 Mbyte oder mehr zu erzeugen. Zwar führt die heute standardmäßig verwendete Kompression zu einer Reduktion um 80-90 %. Dennoch muß der Rechner beim Laden mit der entkomprimierten Datei umgehen und damit kann man leicht jeden durchschnittlichen Personalcomputer in die Knie zwingen. Durch dieses Faktum wird die Routine-Nutzung von VRML zumindest für Biopolymerstrukturen im Moment noch erheblich behindert. In den meisten VRML-Betrachtern gibt es die Möglichkeit, die Qualität der Darstellung (level of detail) zu verändern. Dieser Mechanismus erweist sich für die Manipulation der Moleküle nach dem Laden als sehr nützlich, löst aber das beschriebene Problem nicht.

Ein zweiter Kritikpunkt hängt mit Unterschieden zwischen VRML 1.0 und VRML 2.0 zusammen. Viele Molekülgraphik-Programme, wie z.B. InsightII oder WebLab erzeugen Darstellungen im VRML-1.0-Format, die in Teilen von einem VRML-2.0-Betrachter wie CosmoPlayer nicht korrekt angezeigt werden. Hier muß noch eine ganze Menge an Abstimmungsarbeit geleistet werden, um nicht einen Benutzer nach dem ersten Fehlversuch für immer von der Benutzung von VRML-Darstellungen abzuhalten. Schließlich haben die heutigen VRML-Viewer (bis auf i3D) keine Stereo-Option, was für Biopolymer-Strukturen ein erheblicher Nachteil ist.

Wenn man die Netzwerkfunktionalität zunächst außer acht läßt, ermöglicht VRML nichts anderes als eine einfache Interaktion (Rotation, Translation, Zoom) mit vorher erzeugten und über das Netz übertragenen 3D-Bildinformationen. Hier konkurrieren gegenwärtig drei grundsätzlich verschiedene Ansätze:

- a. die Übertragung von Atomkoordinaten und Start eines lokal zu installierenden Molekülgraphik-Programms (z.B. RasMol)^{12,w52} oder Browser-Plugins (z.B. Chime),^{w49}
- b. die Übertragung sowohl des Visualisierungsprogramms als auch der Atom-Koordinaten und Visualisierung in einem Browser mit Hilfe von Java (z.B. WebMol),^{13,w53}

c. die Übertragung von VRML-Dateien, wobei diese Dateien auf einem Server entweder in fertiger Form vorliegen interaktiv erzeugt werden und Visualisierung mit einem lokal vorhandenen VRML-Betrachter (z.B. CosmoPlayer oder Live3D). ^{w9,w10)}

Für ein Verständnis der nachfolgenden Diskussion sind zunächst einige kurze Erläuterungen zu Java zu geben. Java ist eine von Sun Microsystems entwickelte und auf C++ beruhende Programmiersprache. ^{w3)} Sie erlaubt die Übertragung kompletter Applikationen über das Netz und die Programmausführung auf dem lokalen Rechner. Mit Hilfe einer speziellen Java-Unterstützung durch Netznavigatoren können damit Programme (Applets) ohne aktive Installation durch den Endnutzer auf dem eigenen Rechner ablaufen. Eine solche Strategie erleichtert die Programmwartung extrem. Fehlerkorrekturen und Upgrades müssen nur auf dem Server installiert werden und eine Überlastung dieses Rechners durch die Programmausführung ist ausgeschlossen. Allerdings hängt der Programmstart entscheidend von der Schnelligkeit der Netzübertragung ab und auch die Interpretation des plattformunabhängigen Codes durch die Java-Umgebung wirkt sich negativ auf die Ausführungsgeschwindigkeit aus. Ein in der spezifischen Maschinensprache übersetztes Programm oder ein Plugin für einen Netznavigator hat demgegenüber Geschwindigkeitsvorteile. In der letzten Zeit ist Java3D, eine Erweiterung von Java zur Implementierung von 3D-Szenen, entwickelt worden und es hat Diskussionen über das Verhältnis von Java3D und VRML gegeben. ^{w4)} Es sieht so aus, als würde VRML zu einem Standard für die Beschreibung von 3D-Objekte werden, während der Schwerpunkt bei Java3D auf der Seite der Programmentwicklung liegt.

Zur Übertragung von 3D-Struktur-Informationen über das Internet nach Variante a. wird bei Biopolymerstrukturen heute meist das Public-Domain-Programm RasMol verwendet, das für alle Plattformen kostenfrei zur Verfügung steht. ^{12,w52)} Ein ähnliches Programm mit etwas besseren Visualisierungsmöglichkeiten ist der WebLab Viewer von MSI und auch das amerikanische National Center for Biotechnology Information (NCBI) hat einen einfachen Strukturbetrachter Cn3D entwickelt. ^{w24,w50)} Mit Hilfe der chemischen MIME (Multipurpose Internet Mail Extension) besteht die Möglichkeit, diese Programme nach der Dateiübertragung automatisch starten zu lassen. ^{w51)} Schließlich kann man diese Programme auch als Plugins gestalten (Chemscape Chime). ^{w49)} Der große Vorzug dieser Art der Visualisierung liegt in praktischer Hinsicht in den umfassenden Interaktionsmöglichkeiten des Nutzers und in der problemlosen Manipulation auch größerer Strukturen an weniger leistungsfähigen Rechnern. Ein grundsätzlicher Vorteil ist, daß das jeglicher Visualisierung zugrundeliegende Modell in Form der Atom-Koordinaten lokal zur Verfügung steht. Mit Hilfe von Scripts können auch für RasMol-Darstellungen Informationen über das Netz übertragen werden, die eine bestimmte Darstellung erzeugen.

Die Möglichkeit b., nämlich sowohl die Atom-Koordinaten als auch das Visualisierungsprogramm zu übertragen und mit Hilfe von Java im Netznavigator zu starten ist beispielsweise in dem Programm WebMol realisiert. ^{13,w53)} Allerdings können Programme dieser Art trotz der oben beschriebenen Vorzüge in ihrer Funktionalität noch nicht mit lokal vorhandenen Programme konkurrieren. Dennoch sollte man die Tatsache, daß ein Benutzer keine lokale Installation vornehmen muß, nicht gering schätzen. Wir erwarten deshalb, daß Programme dieser Art eine zunehmende Verbreitung in Bereichen finden werden, in denen es auf vielseitige Funktionalität nicht ankommt. In dieser Beziehung geht nun Variante c. noch einen Schritt weiter. Hier ist noch nicht einmal die auch in einem Java-Programm erforderliche Benutzung von Programmfunktionen notwendig. In einem VRML-Betrachter gibt es lediglich Bedienelemente, wie sie auch für jedes andere 3D-Objekt benutzt werden können. Zum anderen ist die Erzeugung von informativen Darstellungen von Biopolymer-Strukturen eine kreative Leistung und VRML bietet die Möglichkeit, diese Information direkt und in größerem Umfang als RasMol an Nutzer weiterzugeben. Das trifft insbesondere zu,

wenn zur Erzeugung der VRML-Dateien Visualisierungsprogramme benutzt werden, die in ihrer Funktionalität über das, was RasMol oder Chime können, hinausgehen. Der WebLab Viewer von MSI ist nach unserer Überzeugung für Biopolymere das Werkzeug, das gegenwärtig am umfassendsten visuelle Informationen und Annotationen in VRML überträgt. Schließlich soll erwähnt werden, daß VRML-Modelle auch für eine gemeinsame Bearbeitung in einem Konferenz-System wie InPerson beispielsweise geeignet sind.^{w14)}

Die bisherige Diskussion war nahezu ausschließlich auf VRML 1.0 beschränkt.

Anwendungsbeispiele für VRML 2.0 findet man auf dem WebMolecules-Server und in der Darmstädter Normalschwingungs-Visualisierung.^{w44,w45)} Im letzteren Fall ist im oberen Teil des Browser-Fensters ein Schwingungs-Spektrum gezeigt und durch Klicken auf eine bestimmte Frequenz bekommt man im unteren Teil des Fenster die zugehörige Molekülbewegung angezeigt. Obwohl die erweiterten Möglichkeiten von VRML 2.0 noch nicht ernsthaft erkundet sind, treffen nach unserer Auffassung viele der erwähnten Beschränkungen auch hier zu.

Bilanz und Ausblick

VRML entwickelt sich allmählich zu einem Standard für die Beschreibung dreidimensionaler Objekte, der insbesondere auch für die Übertragung dieser Informationen über das Internet wichtig ist. Für Molekülstrukturen muß VRML mit anderen Mechanismen der Informationsübertragung konkurrieren, die in vielen Fällen, zumindest für Biopolymere, gegenwärtig weit effektiver arbeiten. Wir glauben aber, daß VRML auf lange Sicht einen wertvollen Beitrag bei der Beschreibung von molekularen 3D-Daten leisten wird. Als besonders aussichtsreich sehen wir Anwendungsmöglichkeiten in Bereichen, wo eine eingeschränkte Interaktion des Betrachters, z.B. aus pädagogischen Gründen, erwünscht oder die eigene Erzeugung der visuellen Information aus dem zugrundeliegenden Modell nicht einfach möglich ist. Beispiele hierfür könnten dreidimensionale Abbildungen in elektronischen Versionen von wissenschaftlichen Journalen oder von Büchern, sowie niedrigaufgelöste Strukturinformationen, wie sie bei der Elektronenmikroskopie anfallen, sein.^{w38)}

1) S. S. Hall, *Science* **1995**, 267, 620-624.

2) Editorial, *Nature Struct. Biol.* **1997**, 4, 329.

3) J. Sühnel, *Comput. Appl. Biosci.* **1996**, 12, 227.

4) J. Sühnel, *Trends in Genetics* **1997**, 13, 206.

5) J. Sühnel, In: *Bioinformatics. Proceedings of the German Conference on Bioinformatics, GCB '96. Lecture notes in computer science Vol. 1278*, (R. Hofestädt, T. Lengauer, M. Löffler, D. Schomburg, eds.) Springer-Verlag Berlin, **1997**, 189.

6) O. Casher, C. Leach, C.S. Page, H.S. Rzepa, *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **1996**, 368, 49.

7) H. Vollhardt, C. Henn, G. Moeckel, M. Teschner, J. Brickmann, *Journal Mol. Graphics* **1995**, 13, 368-372.

8) J. Brickmann, H. Vollhardt, *Trends in Biotechnology* **1996**, 14, 167.

9) J. S. Kieft, I. Tinoco, Jr., *Structure* **1997**, 15, 713.

10) W. D. Ihlenfeldt, *J. Mol. Mod.* **1997**, 3, 386-402.

11) T. E. Ferrin, C. C. Huang, L. E. Jarvis, R. Langridge, *J. Mol. Graphics* **1988** 6, 13-27, 36.

12) R. A. Sayle, E. J. Milner-White, *Trends Biochem. Sci.* **1995**, 20, 374.

13) D. Walther, *Trends Biochem. Sci.* **1997**, 22, 274.

Internetadressen

Netznavigatoren (Browser)

- w1) Netscape Navigator <http://home.netscape.com/>
 w2) Microsoft Internet Explorer <http://www.microsoft.com/ie/download/>

Allgemeines zu Java und VRML

- w3) Java <http://java.sun.com/>
 w4) Java3D Repository <http://java3d.sdsc.edu/>
 w5) Open Inventor <http://www.sgi.com/Technology/Inventor.html>
 w6) VRML-Informationen von SGI <http://vrmml.sgi.com/>
 w7) VRML Repository
 (San Diego Supercomputer Center) <http://www.sdsc.edu/vrml/>

VRML-Betrachtungssoftware

- w8) i3d Viewer <http://www-venus.cern.ch/i3d/>
 w9) SGI CosmoPlayer <http://cosmo.sgi.com/products/player/>
 w10) Live3D (Netscape Plugin)
<http://home.netscape.com/comprod/products/navigator/live3d/>
 w11) Microsoft VRML Viewer <http://www.microsoft.com/vrml/toolbar/>
 w13) SGI Iris Annotator <http://www.sgi.com/Products/Annotator.html>
 w14) SGI InPerson http://www.sgi.com/Products/inperson_main.html
 w15) SGI WebSpace Navigator <http://webspacesgi.com/WebSpace/>

Programme für die Erzeugung von Molekül-VRML-Darstellungen

- w16) Chemical VRML Generation Service <http://schiele.organik.uni-erlangen.de/services/vrml.html>
 w17) EyeChem Explorer Modules <http://www.ch.ic.ac.uk/EyeChem/>
 w18) MidasPlus <http://cgl.ucsf.edu/midasplus.html>
 w19) MOLCAD <http://www.pc.chemie.tu-darmstadt.de/molcad/>
 w20) MOLDA <http://vbl01.chem.sci.hiroshima-u.ac.jp/molda-j/molda.htm>
 w21) MOLMOL <http://www.mol.biol.ethz.ch/wuthrich/software/molmol/>
 w22) SGI Molecular Inventor <http://www.sgi.com/ChemBio/MolecularInventor/>
 w23) MSI InsightII <http://www.msi.com/info/products/InsightII.html>
 w24) MSI WebLab Viewer <http://www.msi.com/weblab/>
 w25) pdb2vrml <http://ws05.pc.chemie.th-darmstadt.de/vrml/pdb2vrml.html>
 w26) STRUVIR <http://fluo.univ-lemans.fr:8001/vrml/vrml.html>
 w27) Tripos Molecular Inventor Plugin <http://www.tripos.com/MolecularInventor/>
 w28) The Molecular Object Toolkit <http://www.ch.ic.ac.uk/rzepa/eg/>
 w29) The VRML Molecule Toolbox <http://gepasi.dbs.aber.ac.uk/bka/vrml/vmt.htm>
 w30) xtal-3d <http://193.49.43.3/dif/xtal-3d.html>

VRML-Applikationen für Molekülstrukturen

- w31) Crystal Packing Visualization for PDB Files <http://www.mrc-cpe.cam.ac.uk/people/ubc/banff/xpack.html>
 w32) Gallery of 3D VRML Crystal Structures http://193.49.43.3/dif/3D_gallery.html
 w33) Database of Macromolecular Movements <http://bioinfo.mbb.yale.edu/MolMovDB/>
 w34) Inorganic Compounds <http://davinci.ethz.ch/research/3dmodels.html>
 w35) Imperial College Chemistry VRML Gallery <http://chemcomm.clic.ac.uk/VRML/>
 w36) Image Library of Biological Macromolecules <http://www.imb-jena.de/IMAGE.html>
 w37) MathMol Library of 3-D Molecular Structures <http://www.nyu.edu/pages/mathmol/library/>
 w38) Microscope 3-D Database http://www.wadsworth.org/spider_3d/home_page.html
 w39) Molecular Dynamics Calculations <http://physiology.med.jhu.edu/tom/tbw.html>
 w40) Molecules R US <http://molbio.info.nih.gov/cgi-bin/pdb>
 w41) Solvent Excluded Surface Computation
http://www.scripps.edu/pub/olsonweb/people/sanner/html/msms_server.html
 w42) VRML in Chemistry (Aberystwyth) <http://gepasi.dbs.aber.ac.uk/bka/vrml.htm>
 w43) VRML in Chemistry (Bristol) <http://tiger.chm.bris.ac.uk/cm1/TomT/>
 w44) VRML in Chemistry (Darmstadt) <http://ws05.pc.chemie.th-darmstadt.de/vrml/>
 w45) WebMolecules <http://molecules.com/vrmlmols/>

Strukturdatenbanken

- w46) Cambridge Structural Database <http://www.ccdc.cam.ac.uk/>

w47) Protein Data Bank

<http://www.pdb.bnl.gov/>

w48) The Nucleic Acid Database

<http://ndb-mirror-2.rutgers.edu/>

Sonstiges

w49) Chemscape Chime (Plugin)

<http://www.mdl.com/chemscape/chime/chime.html>

w50) Cn3D Structure Viewer (NCBI)

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/cn3d.html>

w51) The Chemical Mime Homepage

<http://www.ch.ic.ac.uk/chemime/>

w52) RasMol

<http://www.umass.edu/microbio/rasmol/>

w53) WebMol

<http://www.embl-heidelberg.de/cgi/viewer.pl>

Abb. 1. VRML-Darstellung einer Metallbindungsstelle (Co(III)(NH₂)₆) in der großen Furche einer Teilstruktur eines Gruppe-I-Intron-Ribozyms (PDB-Code: 1ajf).⁹ (Beispiel aus der Bildbibliothek biologischer Makromoleküle erzeugt mit dem WebLab Viewer und visualisiert mit dem CosmoPlayer Plugin).^{w9,w24,w36}

Abb. 2. VRML-2.0-Beispiel für ein Kalottenmodell der Aminosäure Glycin. Nach der Definition der Atomtypen ist nur noch die Koordinatenangabe erforderlich.

Netscape:
File Edit View Go Communicator Help
Bookmarks Location: http://www.imb-jena.de/vrml/RNA/other_RNA/1ajf/1ajf_weblab_4.wrl.gz

A10 G8 G7 G6 G5 A11 C12 A13 A14 G3 A2 C18

molecule-name-here

© SiliconGraphics

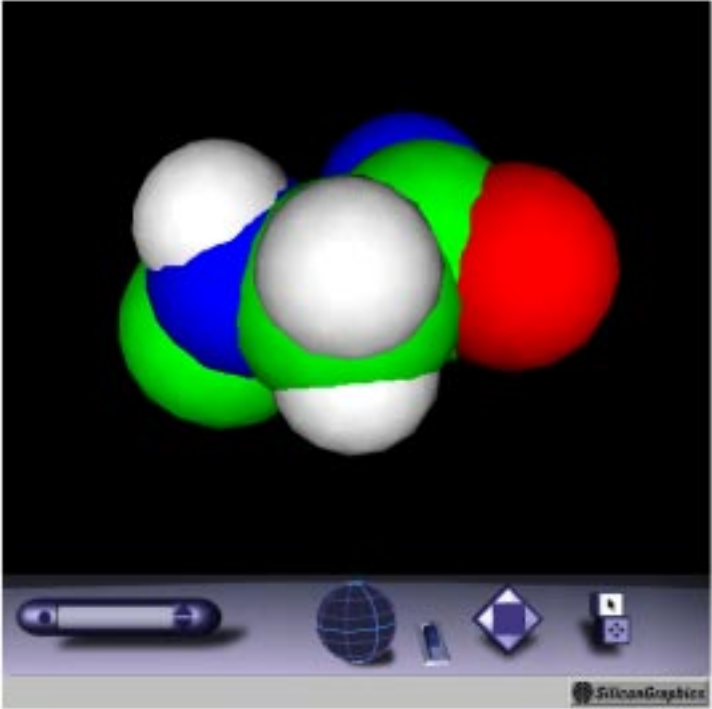


Netscape: File Edit View Go Communicator Help

Bookmarks Location: <http://www.imb-jena.de/~jr/vrml/glycine.html>

VRML V2.0 Example Code

```
#VRML V2.0 utf8
NavigationInfo { type "EXAMINE" headlight TRUE }
PROTO CPK [ exposedField SFVec3f position 0. 0. 0.
  exposedField SFCOLOR atColor 1.0 1.0 1.0
  field SFFloat vdwradius 1.0 ]
( Transform { translation IS position
  children [ Shape { appearance Appearance {
    material Material { diffuseColor IS atColor } |
    geometry Sphere { radius IS vdwradius } | ] ] }
PROTO O [ exposedField SFVec3f translation 0. 0. 0. ]
( CPK { position IS translation atColor 1. 0. 0. vdwradius 1.51 | }
PROTO N [ exposedField SFVec3f translation 0. 0. 0. ]
( CPK { position IS translation atColor 0. 0. 1. vdwradius 1.55 | }
PROTO C [ exposedField SFVec3f translation 0. 0. 0. ]
( CPK { position IS translation atColor 0. 1. 0. vdwradius 1.69 | }
PROTO H [ exposedField SFVec3f translation 0. 0. 0. ]
( CPK { position IS translation atColor 1. 1. 1. vdwradius 1.2 | }
*** Glycine 10 of plastocyanin 1PLC +/- 1 atom of residue 9 and 11 ***
C { translation -0.940 1.808 3.444 } #C -1
N { translation -0.796 0.912 2.476 } #N
C { translation 0.088 1.168 1.344 } #ca
C { translation 1.540 0.772 1.500 } #c
O { translation 2.318 0.972 0.504 } #o
H { translation -1.228 0.116 2.532 } #h
H { translation -0.292 0.648 0.556 } #1ha
H { translation -0.008 2.116 1.060 } #2ha
N { translation 1.976 0.216 2.600 } #N +1
```



SiliconGraphics