Chemische Visualisierung und Datenintegration im Internet

F. Oellien, W. D. Ihlenfeldt

Computer-Chemie-Centrum, Institut für Organische Chemie, Universität Erlangen-Nürnberg, D-91052 Erlangen

K. Engel, T. Ertl

Lehrstuhl für Graphische Datenverarbeitung, Institut für Mathematische Maschinen und Datenverarbeitung, Universität Erlangen-Nürnberg, D-91058 Erlangen

Abstract

In den letzten Jahren hat sich das Internet innerhalb der Naturwissenschaften und hier vor allem im Bereich der Chemie als wichtiges Medium zum Austausch und zur Visualisierung von Daten etabliert. Der Vorsprung von chemischen Informationen gegenüber anderen Wissenschaften basiert dabei auf das Vorhandensein einer kleinen Anzahl von einfachen, klar definierten und nicht textorientierten Datenobjekten wie Spektren, Reaktionen, Strukturen und auch Sequenzen und den damit verbundenen Darstellungsformen. Die zur Zeit verfügbaren Web-basierten chemischen Service sind jedoch im allgemeinen nur für die Lösung von einzelnen, speziellen Fragestellungen aus diesem Kontext ausgelegt. Der chemische Alltag in Forschung und Lehre fordert jedoch die Kombination aller zugänglichen Informationen und deren Visualisierung.
Dieser Artikel beschreibt die Einbettung neuer Daten- und Visualisierungsmodule in ein offenes, chemisches Datenmanagementsystem (CACTVS) im Kontext des Internets. Hierbei werden anhand von verschiedenen Web-basierten Applikationen neue Wege des chemischen Datentransfers und der Visualisierung aufgezeigt.

1. Chemische Information im Internet

Der chemische Alltag beruht zu großen Teilen auf der Abfrage und weitergehenden Analyse von bereits bestehenden Wissen. Im Gegensatz zu anderen Wissenschaften liegt dieses Wissen nicht nur in textueller Form, sondern vielmehr in einer kleinen Anzahl von definierten Datenobjekten vor und ist daher inhaltlich sehr verschieden. Die damit verbundenen arbeits- als auch zeitintensiven Anstrengungen zur chemischen Datenbeschaffung wurden zwar durch die Einführung des WWW stark vereinfacht; dennoch stehen der forschungsorientierte Chemiker als auch der Chemie-Student oft vor großen Problemen, wenn es um die Nutzung der Internet-basierten Daten geht. Dies fängt bei der Datenbeschaffung an und endet bei der Visualisierung und Analyse der chemischen Information. Ein Hauptproblem liegt dabei in der großen Bandbreite des chemischen Wissens. Innerhalb der letzten Jahrzehnte wurden vor allem Programme entwickelt, die nur zur Lösung von einzelnen Frage- und Problemstellungen bestimmt waren. Als Folge dieser Entwicklung arbeiten Chemiker heute mit einer großen Anzahl an plattformabhängigen Programmen, die im allgemeinen untereinander nicht kompatibel sind. So existieren beispielsweise allein ca. 10 wichtige und mindestens 40 exotischere chemische Dateiaustauschformate. Betrachtet man darüberhinaus das Angebot an chemischen Internetservicen, so spiegelt sich auch hier die historisch bedingte Einzelproblemlösung wider. Der große Vorteil des WWW nämlich die einfache Verknüpfung von digitalen Dokumenten und der damit verbundene Informationsfluß wird somit unterbrochen. Der Wissenschaftler ist daher gezwungen die mühevoll gesuchten Informationen visuell auszuwerten, manuell zu analysieren, nach Fehlern zu überprüfen und in eine nutzbare Form zu schreiben.
Ein weiteres Problem, das im Kontext des Internets immer wieder auftaucht, ist das Fehlen von geeigneten, speziellen Mechanismen zur Darstellung der chemischen Information. Zwar kön-

nen Strukturen oder Volumendaten auch als 2D Plots oder Reaktionen in MPEG-Videos dargestellt werden, allerdings enthalten diese Dateiformate keinerlei chemische Information mehr, die weiterverwendet werden könnten. Auch statische 3D-Szenen kommen schnell an Grenzen, wenn es um das Verständnis von komplexeren Sachverhalten geht. Darüberhinaus fordern immer mehr aktuelle Problemstellungen die Entwicklung von drei- und höherdimensionalen Darstellungsformen. So ist z.B. erst durch den Einsatz von Methoden zur dynamischen Visualisierung eine verständliche Dokumentation von komplexen Phänomenen möglich.
Diese Situation fordert den Einsatz eines Web-basierten Systems zur Beschaffung, Analyse und Visualisierung von chemischen Daten. Die Ziele eines solchen Systems sind der lückenlose Informationsfluß zwischen digitalen Dokumenten, die Nutzung von synergetischen Effekten und die Vermeidung von Fehlern und Duplizität bei der Verwaltung der chemischen Information. Diese Ziele stellen besondere Anforderungen. So muß das System in erster Linie ein offenes System sein. Das bedeutet, daß es beliebige chemischen Datenobjekte und Datenformate erkennen und verwalten muß. Darüberhinaus sollte es beliebig erweiterbar sein, um auch mit zukünftigen chemischen Informationen zu arbeiten.
Das CACTVS-System [1,2] stellt ein solches offenes, chemisches Datenmanagementsystem dar. Die in diesem Artikel erwähnten Web-basierten Applikationen basieren auf der offenen Datenmanagementbibliothek dieses System und sind in der Lage, die oben beschriebenen Probleme hinsichtlich der chemischen Datenintegration und Visualisierung zu bewältigen.

2. Architektur der Web-basierten Applikationen

Der typische Aufbau eines CACTVS-basierten Online-Service ist in Abbildung 1 dargestellt. Die Applikation besteht dabei aus einem Benutzer-Teil, welcher sich in Eingabe und Ausgabe gliedert, einer dünnen CGI-Schicht und der CACTVS-Kern-Bibliothek. Zudem können beliebige externe Programme einbezogen werden. Die benutzerdefinierte Eingabe von chemischen Informationen kann auf zwei Wegen erfolgen. Zum einen kann der Benutzer direkt chemische Daten an den Service übermitteln, indem er über ein HTML-Formular chemische Datenformate einliest. Der Online-Service ist dabei nicht auf eine limitierte Anzahl von bestimmten Datenobjekten und -formaten beschränkt, sondern kann in dieser Hinsicht kontinuierlich erweitert werden. Der Benutzer kann außerdem mit Hilfe von Java-Applets [3] chemische Strukturen zeichnen und diese Informationen an das HTML-Formular übergeben. Diese Art der Eingaben finden sich beispielsweise in den chemischen Servicen *OrbVis* [4] und *ComSpec3D* [5] wieder. Auf der anderen Seite kann die Applikation auch direkt chemische Information aus anderen digitalen Dokumenten übernehmen. Diese Web-typische Art der Verknüpfungen von digitalen Dokumenten ermöglicht somit den lückenlosen, kohärenten und flexiblen Transfer von strukturellen oder auch anderen chemischen Daten im Internet. Unsere Arbeitsgruppe konnte auf diese Weise eine einfache Verknüpfung zwischen Dokumenten des DFG *Dissertation Online* Projektes [6] und unseren Online-Servicen ermöglichen. Im Rahmen des ‘Molecule of the Month’ Projektes [7] wurde ebenfalls die Verknüpfung meherer Online-Dienste vorgestellt. Das CGI-Script ist im allgemeinen nur einige zehn Zeilen lang. Es kontrolliert lediglich die Kommunikation zwischen Client und Server bzw. Benutzer und Datenmangementsystem. Die Verwaltung, Analyse und Beschaffung der chemischen Informationen wird alleine durch das offene Datenmanagementsystem bewältigt. Die Funktionsweise und der Aufbau des CACTVS-Systems wird im nächsten Abschnitt detailiert besprochen.

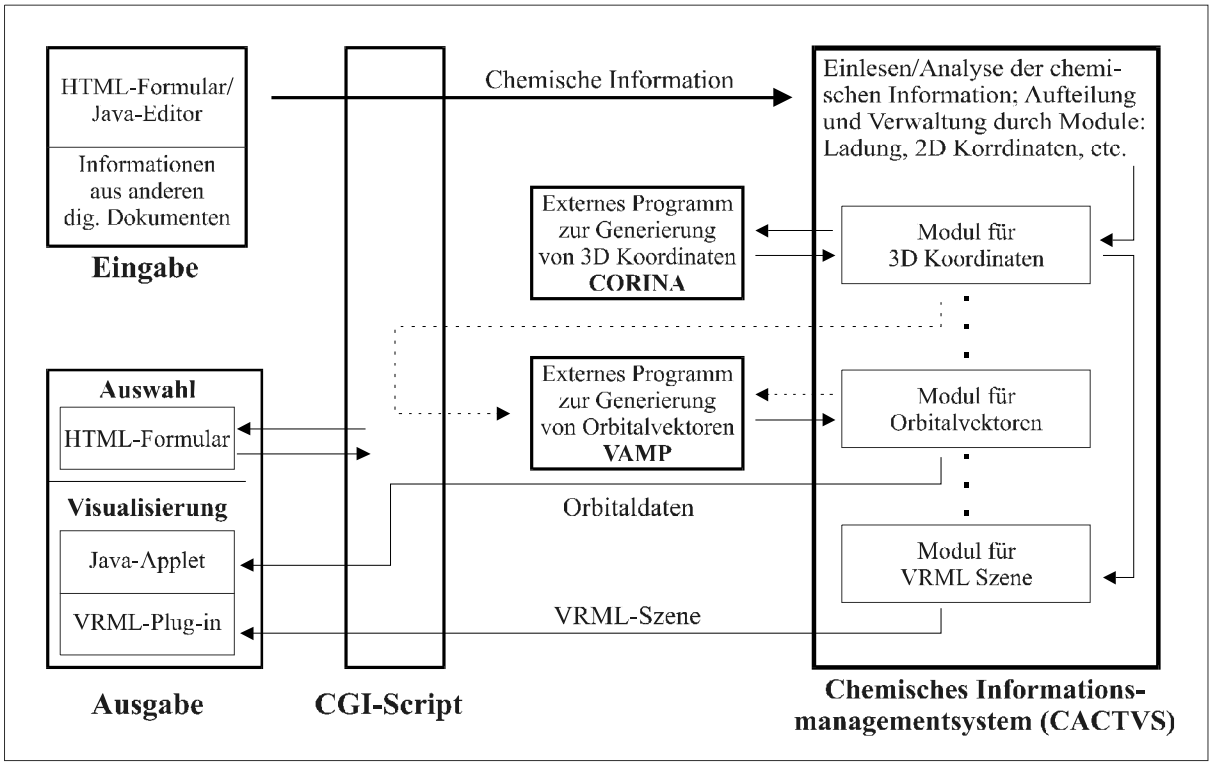

Abbildung 1: Schematische Darstellung eines Web-Services, - - - : alternative Pipeline

Das CACTVS-System verfügt ebenfalls über Module zur Generierung von 2D- und 3D-Daten (z.B. Molekülzeichnungen als GIF-Dateien, 3-D-Molekülmodelle als VRML-Dateien, etc.). Mit Hilfe von Plug-ins und Java-Applets lassen sich diese Dateiformate anschließend betrachten. In Hinblick auf dynamische Visualisierungsmethoden und der chemischen Weiterverarbeitung bzw. Analyse der visualisierten, chemischen Daten wurden in unsere Projektgruppe auch Client-seitige Visualisierungsmethoden entwickelt, die sich einfach in das Gesamtgefüge einbinden lassen. Der vierte Teil dieses Artikel widmet sich den Visualisierungsmethoden unserer Web-basierten Applikationen.

3. Aufbau und Funktion des CACTVS-Systems

Die Probleme bei der Beschaffung, Analyse und Verarbeitung von chemischen Daten im Kontext des Internets wurden bereits am Anfang dieses Artikels beschrieben. Als Lösungsansatz wurde daher vor 5 Jahren das CACTVS-System entwickelt. Diese System hat sich mittlerweile zu einer mächtigen Plattform entwickelt, die eine große Anzahl von Komponenten und Modulen umfaßt. Das Herzstück dieses System ist eine gemeinsame Kern-Bibliothek, welche als flexibler und offener Datenmanager fungiert. Alle Aspekte der Daten-beschaffung, -management, -analyse, -manipulation und -ausgabe werden durch die Bibliothek gehandhabt. Dabei ist das System so aufgebaut, daß es mit allen wichtigen Formen der chemischen Information und Datenobjekten funktioniert. Der offene Charakter des Systems wird vor allem dann deutlich, wenn das System mit unbekannten Informationsformen konfrontiert wird. Die Information geht nicht verloren, sondern wird während des Programmlaufs analysiert, definiert und steht sofort wieder zur Verfügung. Abbildung 2 zeigt den schematischen Aufbau des Kernsystems. Einige der zentralen Eigenschaften der dort dargestellten Bibliothek sollen in diesem Abschnitt genauer betrachtet werden.

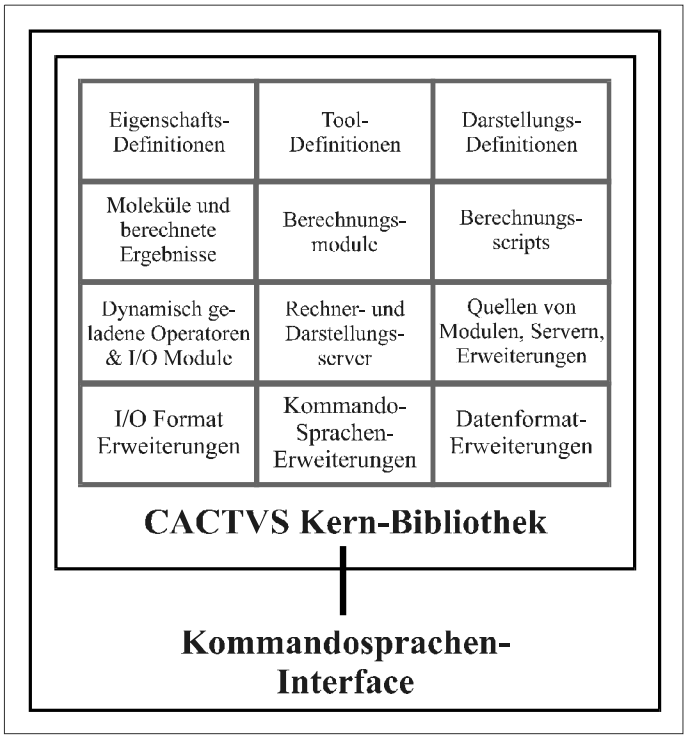

Abbildung 2: Schematische Darstellung des CACTVS-Systems

3.1 Unbegrenzte Daten-Erweiterungsmöglichkeit

Das Gros der heute zugänglichen, Web-basierten Services spiegelt die Strategie der Einzelproblemlösung wieder, wie sie im allgemeinen auch bei plattformabhängiger Chemie-Software angetroffen wird. Gerade im Kontext des Internets muß dieser Zustand jedoch als äußerst unbefriedigend angesehen werden. Ein generelle Forderungen an das CACTVS-System war daher die Erweiterbarkeit des System. Jede Form von chemischer Information wird durch externe Eigenschaftsdeskriptoren beschrieben. Diese Deskriptoren kapseln alle Informationen, die das System zur Verwaltung, Analyse und Generierung der Daten benötigt. Hierzu zählen auch Methoden, die Abhängigkeiten und Verknüpfungen zwischen einzelnen Eigenschaftsbeschreibungen regeln. Der offene Charakter des Systems erlaubt hierbei die beliebige Erweiterung der Bibliothek mit weiteren Deskriptoren, um auch exotischere Informationsformen zu verwalten. Das System ermöglicht ebenfalls die Speicherung identischer Informationsbeschreibungen, z.B. unterschiedlicher Herkunft, durch Anlegen multipler Instanzen einer Eigenschaftsbeschreibung.
Neben den Modulen zur Datenbeschreibung kann das System zur Laufzeit auch mit dynamisch ladbaren Modulen zur Behandlung des I/O von Dateien in verschiedenen Formaten, zur Anbindung an Datenbanken, zur Implementation von Rechenverfahren, zur Objektdarstellung oder zur Verwaltung von Datentypen ergänzt werden. Diese Modularität ermöglicht damit auch die Analyse und Verwaltung von zunächst undefinierten Datenobjekten. Somit bleibt ein Maximum an Information im System erhalten.

3.2 Automatische Lookup- und Generierungs-Mechanismen

Die dynamische Erweiterbarkeit der Bibliothek ist nicht nur auf eine lokale Lösung ausgelegt. Vielmehr können alle Erweiterungen während der Laufzeit von Dateien und Datenbanken sowohl aus einem lokalen Netz als auch aus dem Internet geladen werden. Dieser Vorgang läuft dabei vollkommen automatisch und für den Benutzer transparent ab. Der Benutzer braucht sich ebenfalls um Abhängigkeiten und Voraussetzungen bei der Abfrage von Informationen keine Gedanken machen. Beispielsweise müssen bei der Übergabe von atomaren 2D-

Koordinaten und der anschließenden Abfrage der zugehörigen VRML (Virtual Reality Modeling Language)-Szene erst einmal verschiedene andere chemische Informationen zur Verfügung stehen. So benötigt man zur Darstellung einer VRML-Szene 3D-Koordinaten. Das System sucht daraufhin automatisch nach einer geeigneten Eigenschaftbeschreibung. Falls dieses Modul noch keine Informationen beinhaltet, wird automatisch die gekapselte Methode zur Generierung dieser Daten gestartet. Im Fall von 3D-Koordinaten bedeutet dies, daß ein externes Programm [8] mit der Generierung beauftragt wird. Bei der Generierung von bestimmten Daten können oft auch weitere sekundäre Informationen auftauchen, die dann automatisch in entsprechenden Datenslots gespeichert werden. Aufwendige Berechnungen, die mehr als nur eine Information liefern, brauchen somit nicht wiederholt aufgerufen werden.

3.3 VHLL Skriptsprache

Der Zugriff auf die Kern-Bibliothek erfolgt durch eine mächtige Skriptsprache, den Industriestandard Tcl/Tk [9] mit einigen Erweiterungen. Diese Skriptsprache wurde um einen umfangreichen Satz an chemischen Daten- und Strukturmanipulationskommandos ergänzt. Durch dieses Interface können alle Objekte innerhalb der Bibliothek angesprochen und manipuliert werden. Darüberhinaus kann die Skriptsprache leicht durch Prozeduren und weitere dynamisch ladbare Module erweitert werden.
Das CGI-Skript in den Web-basierten Applikationen dient nicht nur als Internet-Schnittstelle zwischen Client und Server, sondern übernimmt gleichzeitig die direkte Kommunikation mit dem Tcl-Interface. Die Konsequenz sind sehr kurze und einfach aufgebaute CGI-Skripts.

4. Visualisierungmethoden

Die Datenvisualisierung stellt eine weitere Hürde bei der Darstellung von chemischen Inhalten im Internet dar. In unserer Projektgruppe wurden daher neue Ansätze und Methoden zur Visualisierung von wissenschaftlichen Inhalten entwickelt. So besitzt das CACTVS-System eine Reihe von Modulen, die für die Darstellung von chemischen Informationen verantwortlich sind. Neben der Ausgabe von 2D-Plots ist auch die Generierung von VRML-Szenen möglich. Statischen 3D-Szenen, wie im Fall des VRML 1.0 Standards stoßen bei der Darstellung von komplexen Sachverhalten schnell an Grenzen. Die VRML-basierten Darstellungsmodule des CACTVS-Systems basieren daher auf dem VRML 2.0 Standard [10], der die Animation von komplexen Sachverhalten und vor allem die Echtzeit-Interaktion des Benutzers erlaubt. Diese Echtzeit-Interaktion und -Navigation ermöglicht erst eine effektive Analyse von unbekannten Datensätzen und kompensiert den Datenverlust, der bei der Projektion von chemischer Information erfolgt. Mit Hilfe dieser Module konnten wir Web-basierte Applikationen entwickeln, die dem Benutzer auch weitergehende Analysen und Ausgaben von chemischer Information innerhalb der Szenen ermöglichen [11].
Bei der Betrachtung von komplexeren Problemstellung, die z.B. bei der Kombination von strukturellen Daten mit anderen chemischen Informationen auftreten, ist der Einsatz von einfachen VRML-Dateien weniger sinnvoll. Um ein hohes Maß an Interaktivität und Dynamik bei der Visualisierung zu gewährleisten, wurde daher eine Reihe an externen Visualisierungsmethoden entwickelt. Diese sich am Internet-Standard orientierenden Applikationen basieren auf der plattformunabhängigen Programmiersprache Java, die sich als der *de-facto* Standard für die Programmentwicklung im WWW durchgesetzt hat. Auf der einen Seite können die Java-Applets chemische Information einschließlich VRML-Szenen vom CACTVS-System entgegennehmen. Die VRML-Dateien können als Basisszenen eingesetzt werden und mit anderen chemischen Daten kombiniert werden. Auf der anderen Seite realisiert das Applet eine grafische Benutzeroberfläche, über die der Benutzer alle Parameter zur Manipulation und Analyse der molekularen Szene beeinflußen kann. Die Kommunikation zwischen dem Java-Applet und dem VRML-Plug-in erfolgt dabei über das External Authoring Interface (EAI) [12].
Neben der Verwendung von VRML können auch andere Technologien, wie Java3D [13] oder OpenGL problemlos mit den Java-Applikationen kombiniert werden.

5. Beispielapplikationen

Die mit unserer Architektur ermöglichten neuen Wege zur Vermittlung von chemischen Informationen sollen anhand von zwei öffentlich zugänglichen Online-Diensten sowie anhand eines bekannten chemischen, Internet-basierten Lehr- und Informationsdienstes hervorgehoben werden.
Die beiden Internetdienste *OrbVis* und *ComSpec3D* wurden vor allem wegen der Notwendigkeit einer didaktischen Erschließung eines tendenziell sehr theoretischen Gebietes der Chemie - der Quantenchemie - entwickelt. Aufgrund des abstrakten Charakters und dem großen Anteil an hoher Mathematik empfinden angehende und auf diesem Gebiet nicht spezialisierte Chemiker diesen Teil der Chemie als schwer zugänglich. Dennoch muß jeder Chemiker ein solides Grundwissen auf diesem Gebiet besitzen, da die Quantenchemie die Grundlage für das Verständnis vieler wichtiger Phänomene in der Chemie darstellt. Durch die einfache Handhabung und die dynamische Visualisierung der Online-Dienste begreift der Benutzer fast spielerisch die Zusammenhänge, die im textuellen Kontext noch unverständlich erschienen. Der Benutzer kann durch einen Java-Editor chemische Strukturen einfach an den Service übergeben (Abbildung 3, linkes Fenster).

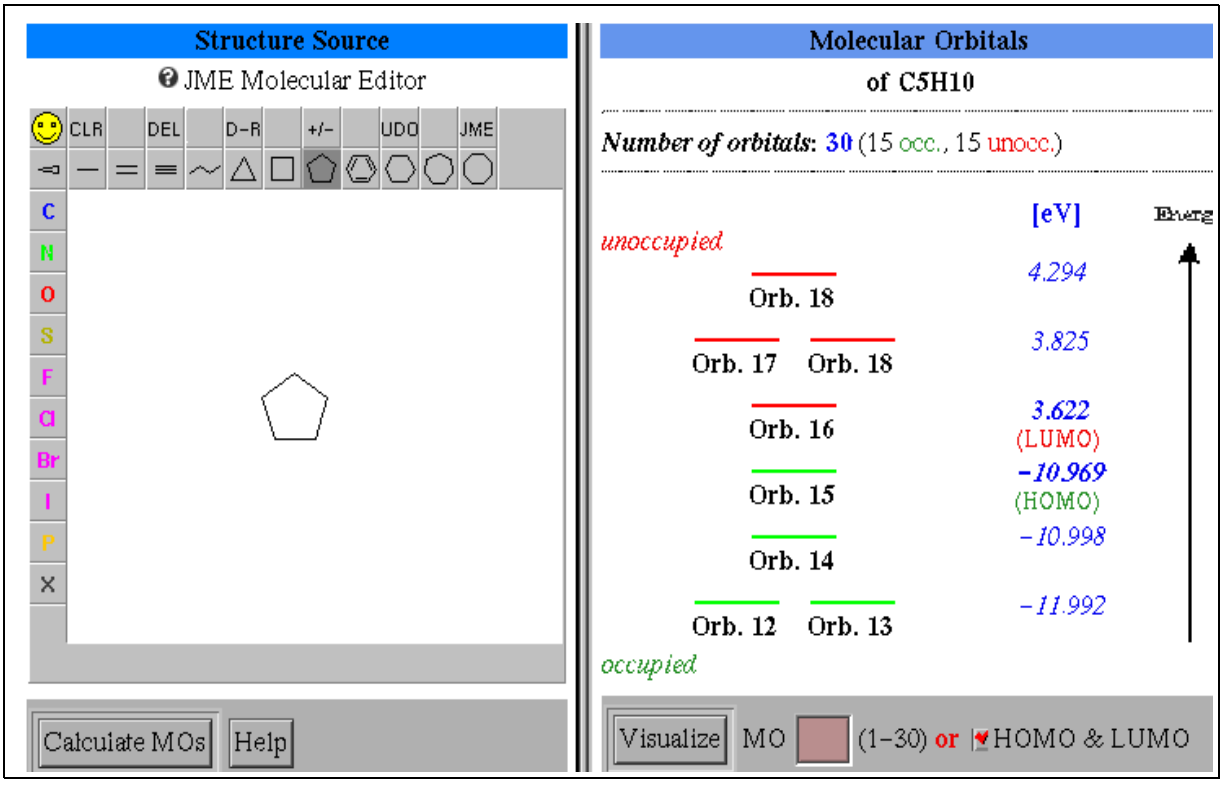

Abbildung 3: *OrbVis* Online-Dienst zur Generierung von Molekülorbitalen (MO); links: Eingabe der chemischen Strukturen mittels eines Java-Applets, rechts: Ausgabe der Energieniveaus sowie Auswahlmenü zur Visualisierung eines bestimmten MO.

Alle weiteren chemischen Informationen, die für die Berechnung notwendig sind, müssen nicht vom Benutzer eingegeben werden, sondern werden aufgrund der einzigartigen Architektur der CACTVS-Bibliothek automatisch generiert bzw. angefordert. So werden beispielsweise 3D-Koordinaten und alle wichtigen quantenchemische Informationen durch Aufruf von entsprechenden kommerziellen, externen, Server-seitigen Programmen [8, 14] generiert. Nach der Datenanalyse wird dem Benutzer eine Übersicht der berechneten Daten im HTML-Format präsentiert (Abbildung 3, rechtes Fenster). Nachdem der Benutzer eine Auswahl getroffen hat werden bei *ComSpec3D* animierte VRML-Szenen angezeigt, die wiederum durch ein spezifisches Modul innerhalb der CACTVS-Biblithek generiert wurden. Bei *OrbVis* werden durch das CACTVS-System ebenfalls VRML-Szenen generiert. Die Volumenvisualisierung der

Molekülorbitale erfolgt jedoch durch die Integration eines Java-Applets (Abbildung 4).

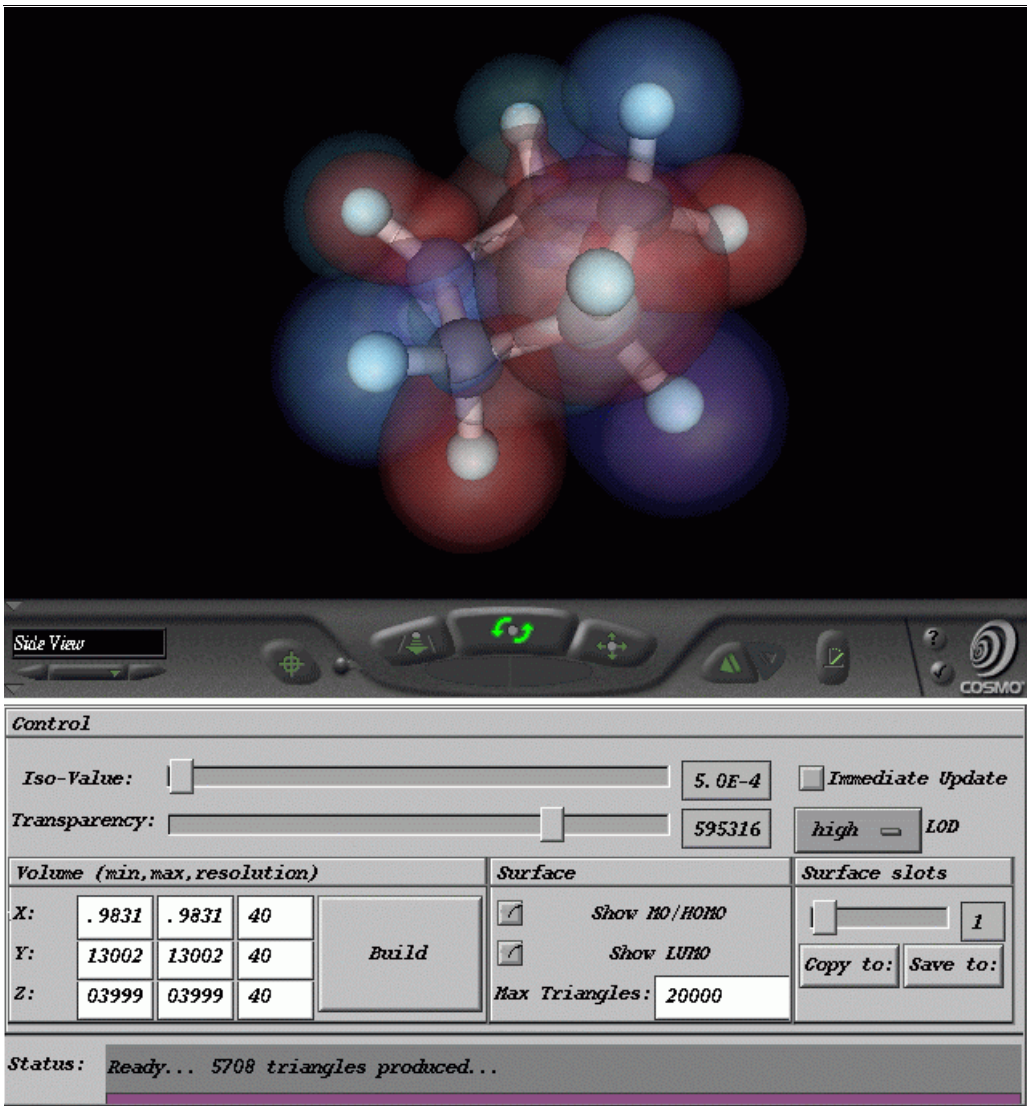

Abbildung 4: *OrbVis* Online-Service; Java Applet und VRML-Plug-in

Die Java-basierte Applikation nimmt dabei sowohl VRML-Szenen als auch Informationen über die molekularen Orbitalvektoren entgegen (Abbildung 1). Dem Applet liegen damit alle chemischen Informationen zur Darstellung der Molekülorbitale vor, was eine komplette lokale Interaktion auf der Client-Seite ermöglicht. Die Berechnung der Volumendaten, die Generierung der Isoflächen durch einen Marching-Cubes Algorithmus [15] sowie die Kombination aller Daten in der Basisszene werden vollständig vom Applet übernommen. Diese Architektur beinhaltet mehrere Vorteile. Zum einen ist die Menge der über das Internet transportierten Daten klein, da die Berechnung der verhältnismäßig großen Volumendaten vollständig auf der Seite des Client durchgeführt werden kann. Diese Client-seitige Berechnung unterstützt dabei auch die gute 3D- und hohe Prozessor-Leistung heutiger Personalcomputer. Der maßgebende Vorteil der Applikation liegt jedoch in der Gewährleistung einer schnellen Reaktion auf Benutzereingaben und der damit einhergehenden bestmöglichen Interaktion mit den darzustellenden Daten. Der Benutzer kann z.B. den Detailierungsgrad und die Transparenz der Orbitale einstellen, einzelne Orbitale voneinander getrennt an- oder ausschalten oder aber die Grenzwerte für die Orbital-Isoflächen dynamisch ändern, so daß die Elektronendichteverteilung der Orbitale interaktiv verfolgt werden kann. Jeder Effekt, der durch eine benutzerabhängige Wertänderung hervorgerufen wird, wird sofort in der Basisszene angezeigt.

Schließlich wollen wir noch die Einbettung einer Reihe von CACTVS-basierten Internet-Applikationen in ein Web-basiertes, chemisches Lehr- und Informationsprojekt vorstellen. Das 'Molecule of the Month' Projekt wurde entwickelt, um Schülern, Studenten und Chemikern Informationen zu aktuellen, interessanten Verbindungen wie z.B. *Viagra* über das Internet zu vermitteln. Im Rahmen dieses Projektes stellte unsere Gruppe das Molekül *Adrenalin* vor [16]. Bei der Erstellung der digitalen Dokumente lag der wissenschaftliche Anspruch auf der Realisierung einer lückenlosen Verknüpfung mit unseren Web-zugänglichen Applikationen. Dieses Ziel konnte vollständig auf der Seite der HTML-Programmierung gelöst werden; Veränderungen an der Architektur unserer Applikationen waren aufgrund des offenen Charakters wie erwartet nicht nötig.

6. Zusammenfassung und Ausblick

Aufbauend auf dem offenen Datenmanagementsystems CACTVS konnten wir zahlreiche Applikationen entwickeln, die einen kontinuierlichen Datenfluß von Maschienen-lesbaren, chemischen Informationen im Kontext des Internets erlauben. Darüberhinaus wurden eine Reihe neuer Visualisierungsmethoden entwickelt und integriert, die auch die Darstellung von komplexen chemischen Sachverhalten bewältigen können. Mit Hilfe dieser Tools ist es möglich beliebige strukturelle und andere chemische Informationen zu analysieren, zu generieren, zu verwalten und zu visualisieren. Der offene und flexible Charakter des Systems erlaubt den lückenlosen Datentransfer zwischen digitalen Dokumenten sowie den problemlosen Ausbau des Systems mit weiteren Daten- und Visualisierungsmodulen. Durch diese Architektur können auch zukünftige komplexere chemische Sachverhalte im Internet dargestellt und vermittelt werden. Die Einbeziehung neuer Visualisierungstechnologien wie Java 3D oder X3D ist möglich und realisiert damit ein hohes Niveau an dynamischer und interaktiver Visualisierung.

7. Literatur

[1] Ihlenfeldt, W. D., Takahashi, Y., Abe, H., Sasaki, S., *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **34**, 1994, 109.

[2] Ihlenfeldt, W. D., Takahashi, Y., Abe, H., *Proc. 28th Annual Hawaii Int. Conf. On System Sciences,* **5**, 1995, 227-236.
Siehe auch: http://www2.ccc.uni-erlangen.de/cactvs/

[3] Ertl, P., *Chimia*, **52**, 1998, 673-677.

[4] OrbVis-Homepage:
http://www2.ccc.uni-erlangen.de/services/orbital/

[5] ComSpec3D-Homepage:
http://www2.ccc.uni-erlangen.de/services/vrmlvib/

[6] Homepage von Dissertation-Online:
http://www.educat.hu-berlin.de/diss_online/
siehe auch: http://www2.ccc.uni-erlangen.de/dissertationen/

[7] Homepage von 'Molcule of the Month' (Universität Bristol):
http://www.bris.ac.uk/Depts/Chemistry/MOTM/motm.htm

[8] Sadowski, J., Gasteiger, J., *Chemical Reviews*, **93**, 1993, 2567.

[9] Ousterhout, J. K., *Tcl and the Tk Toolkit*, Addison-Wesley Developper Press, 1994;
siehe auch: http://www.scriptics.com/

[10] Carey, R. und Bell, G., *The Annotated VRML 2.0 Reference Mannual.*, Addison-Wesley Developper Press, 1997.

[11] Online-Applikationen der ChemVis-Projektgruppe:
http://www2.ccc.uni-erlangen.de/projects/ChemVis/projects_dt.html

[12] Marrin, C., Proposal for a VRML 2.0 Information Annex. http://cosmosoftware.com/developer/moving-worlds/spec/ExternalInterface.html, 1997.

[13] SUN Microsystems. Java3D API Specification. http://www.javasoft.com/products/java-media/3D/forDevelopers/j3dguide/j3dTOC.doc.html, 1998

[14] Clark, T., *et al.*, VAMP 7.0, Oxford Molecular Ltd., Oxford, England
[15] Lorensen, W. E., Harvey, E. C., *ACM Computer Graphics*, **21**(24), 1987, 163-169.
[16] Homepage des Molecule of the Month - Monat Mai *Adrenalin*: http://www2.ccc.uni-erlangen.de/projects/ChemVis/motm/