



Das virtuelle Molekül-Mikroskop



Universität des Saarlandes/Bellhäuser - das bilderwerk
Mit der BallView-Software können komplexe Moleküle wie hier Aspirin dargestellt werden.

23.02.2009: Wenn neue Medikamente entwickelt oder biochemische Prozesse untersucht werden, müssen sich Forscher die Formen und Strukturen der Moleküle vorstellen können. Bioinformatiker in Saarbrücken und Tübingen haben dafür die frei verfügbare Software BALLView entwickelt, die es Nutzern ermöglicht, am Bildschirm Moleküle zu betrachten und zu bearbeiten. Jetzt können damit komplexe Moleküle auch mit Licht, Schatten und Spiegelungen auf interaktive Weise dargestellt werden. Die sehr realistischen, dreidimensionalen Bilder werden mit Hilfe des aus der Computergrafik bekannten Ray-Tracing-Verfahrens erzeugt.

Mit der Software BALLView können komplizierte Moleküle und deren physikalische Eigenschaften, aber auch umfangreiche biologische Systeme wie etwa Viren berechnet und visualisiert werden. Dies spielt unter anderem eine Rolle, wenn man Medikamente verbessern will und dafür das Medikament wie ein Schlüssel - sowohl geometrisch als auch

chemisch - in das Schloss, also die Bindetasche des biologischen Systems passen muss. Die besondere Herausforderung ist es hierbei, auf einem zweidimensionalen Bildschirm oder einer Projektionsleinwand eine anschauliche räumliche Darstellung zu erzeugen.

In einem Forschungsprojekt mit dem Computergraphik-Team von Prof. Philipp Slusallek haben die Saarbrücker Bioinformatiker um Dr. Andreas Hildebrandt jetzt die neue Visualisierungsbibliothek RTfact mit BALLView kombiniert. Damit können die räumlichen Strukturen der Moleküle in 3D in sehr realistischen Darstellungen mit Beleuchtung, Schattenbrechungen und Spiegelungen interaktiv dargestellt werden. Durch besondere graphische Effekte wie der Umgebungsverdeckung (Ambient Occlusion), der Lichtdämpfung (Light Attenuation) und der reflektierenden Oberflächen entsteht ein starker 3D-Tiefeneindruck, durch den die räumlichen Moleküle schnell und intuitiv erfasst werden können. Zum Einsatz kommen dabei auch moderne 3D-Eingabegeräte wie die 3D-Spacemouse, mit der man in virtuellen Umgebungen Objekte bewegen kann, oder das so genannte Headtracking, das die Kopfbewegungen des Anwenders über Infrarotsensoren erfasst. Damit können die Forscher die Proteine, DNA-Moleküle und Viren virtuell auf dem Bildschirm interaktiv von allen Seiten betrachten, in einzelne Bereiche hineinzoomen und auf diese Weise ganz neue Aspekte erforschen.

BALLView ist im Rahmen eines Forschungsprojektes am Max-Planck-Institut für Informatik in Saarbrücken entwickelt worden. Heute wird das Open-Source-Programm von drei Forscherteams an den Zentren für Bioinformatik in Saarbrücken und Tübingen weiter entwickelt. Beteiligt sind unter anderem Dr. Andreas Hildebrandt, Nachwuchsgruppenleiter im Zentrum für Bioinformatik der Universität des Saarlandes, Prof. Dr. Hans-Peter Lenhof (Universität des Saarlandes) Prof. Dr. Oliver Kohlbacher (Universität Tübingen) und Anna Dehof (Universität des Saarlandes). Die Raytracing-Bibliothek RTfact wird am Lehrstuhl von Prof. Dr. Philipp Slusallek entwickelt. Beteiligt sind unter anderem Prof. Slusallek, Iliyan Georgiev und Lukas Marsalek von der Universität des Saarlandes.

Die Visualisierungstechnik für Biomoleküle wird vom 3. bis 8. März auf der CeBIT 2009 in Hannover am Forschungsstand des Saarlandes (Halle 9, Stand B 43) demonstriert. Die Wissenschaftler stehen während dieser Zeit für Interviews zur Verfügung.

<http://www.bionity.com/de/news/97265/>

© 1997-2011 CHEMIE.DE Information Service GmbH