



JOELib - Eine plattformunabhängige Computational chemistry-Bibliothek in Java

Zielsetzung

- Entwicklung einer einheitlichen *OpenSource*- Plattform
- Deskriptorentwicklung/-validierung.
- Algorithmenentwicklung
- Schnittstelle für externe Programme (z.B. Petra, Corina, MOE, XlogP)



Was ist JOELib ?

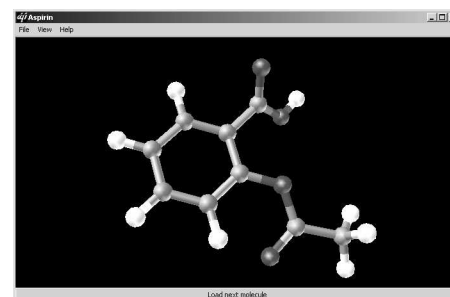
JOELib basiert auf der OELib-Bibliothek von EyesOpen. Die Java-Bibliothek soll eine transparente Entwicklung von Algorithmen erleichtern und die Visualisierung von Molekül- und Analysedaten im Bereich des Wirkstoffdesign ermöglichen.

Funktionen von JOELib

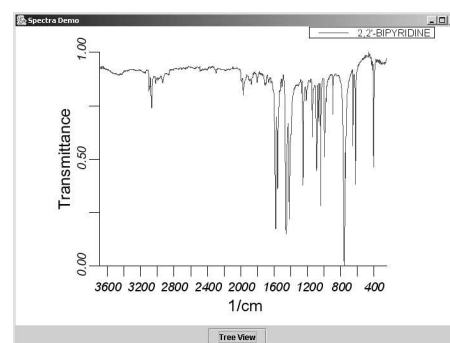
- Basisklassen zur Berechnung von Deskriptoren sowie Klassen zum Import/Export fremder Deskriptordaten als Atom- oder Bindungseigenschaften.
- Dynamische Definition von Deskriptorklassen.
- Dynamische Definition von Molekül-Import- und Exportfiltern, z.B.: MDL-SD, SMILES, CACTVS-ClearTextFormat, Chemical Markup Language (CML), POVRay
- Prozessklassen und externe Prozesse mit Filterfunktionalität
- Matrix-Operationen mit Jama
- Logging (Debugging)-Funktionalität mit Log4J
- Automatische Bestimmung von aromatischen Atomen und Atomhybridisierungen
- Berechnung partieller Ladungen (Gasteiger-Marsili)
- Methoden zum Hinzufügen und Löschen von Wasserstoffatomen mit pH-Wert-Korrektur
- 'SMiles Arbitrary Target Specification' (SMARTS)-Substruktursuche
- Programmable ATom Typer (PATTY)

Anbindung an externe Module:

- Aufruf externer Programme, z.B. Petra, Corina, ...
- Molekülvisualisierung mit Java3D oder POVRay
- JCAMP-DX-Parser und Visualisierung mit dem Scientific Graphics Toolkit (SGT)
- Berechnung von über 40 verschiedenen Deskriptoren und Berechnung von pharmakologisch relevanten Fingerprints.



Java3D-Visualisierung von Aspirin als *Ball & Sticks*.



Infrarot (IR)-Spektrum von 2,2'-Bipyridin.

Zusammenfassung

- Basisfunktionalitäten zur Algorithmen-Entwicklung
- Leichter Aufbau von Prozess- bzw Filterketten.
- Deskriptorentwicklung sowie Methoden/Klassen zum Laden, Speichern und Parsen von Deskriptoren.

Dieses Projekt wird aus Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert (Kennz. 311681).