

MORTAR

Autoren: Felix Bänsch^{1,2,a}, Jonas Schaub^{1,2,b}, Christoph Steinbeck^{2,c}, Achim Zielesny^{1,d}
¹ Institut für biologische und chemische Informatik, Westfälische Hochschule, Recklinghausen
² Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Friedrich-Schiller-Universität, Jena
 ORCID: ^a 0000-0001-8973-8463, ^b 0000-0003-1554-6666, ^c 0000-0001-6966-0814, ^d 0000-0003-0722-4229

Mit **MORTAR (MOleculE fRagmentation fRamework)** präsentieren wir ein offenes Softwareprojekt, das Arbeitsabläufe zur molekularen Fragmentierung und Substrukturanalyse unterstützt. MORTAR bietet grafische Funktionen zur Visualisierung der Fragmentierungsergebnisse einzelner Verbindungen oder ganzer Verbindungssätze. Mit verschiedenen Ansichten und Analysefunktionen unterstützt MORTAR die Interpretation der Fragmentierungsergebnisse. Zusätzlich zu den drei derzeit integrierten Methoden zur Fragmentierungs- und Substrukturanalyse (ErtlFunctionalGroupsFinder [1], Sugar Removal Utility [2], Scaffold Generator [3]) ermöglicht MORTAR die unkomplizierte Integration eigener Fragmentierungsalgorithmen durch die Implementierung eines MORTAR-spezifischen Interfaces mit automatischer Generierung von Einstellungsmenüs. Alle chemoinformatischen Funktionalitäten sind auf der Basis des Chemistry Development Kit (CDK) implementiert. Als offenes Software-Projekt ist MORTAR auf GitHub [4] verfügbar.

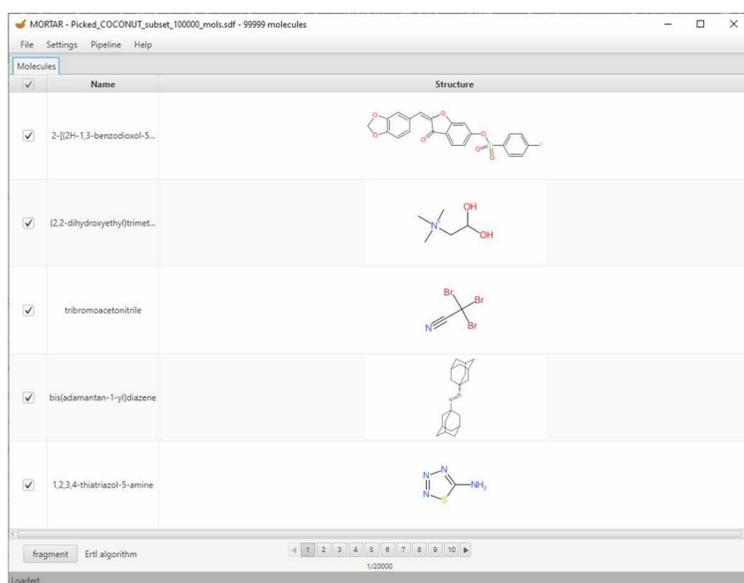


Abb 1: MORTAR-Hauptansicht mit einer mehrseitigen Übersicht über 100.000 Moleküle, die aus der offenen COCONUT-Datenbank für Naturstoffe importiert wurden.

Structure	SMILES	Sample Parent	Sample Pa...	Frequency	Percentage	Molecule Freq...	Molecule Perc...
<chem>CH4</chem>	C	<chem>CC1=CC=C(C=C1)C(=O)O</chem>	Adrenaline ...	128680	14.87%	60633	60.63%
<chem>H</chem>	[H]OC	<chem>C1CC2C(C1)O2</chem>	4-(1H-1,3-...	92493	10.69%	39885	39.89%
<chem>O</chem>	*O*	<chem>C1=CC=C(C=C1)C(=O)O</chem>	5-[4-[[4-...	53473	6.18%	32031	32.03%
<chem>N</chem>	*n[*]	<chem>C1=CC=C(C=C1)C(=O)O</chem>	3-[9H-pyr...	37972	4.39%	20234	20.23%
<chem>C=C</chem>	C=C	<chem>CCCCCCCC</chem>	pentyl hept...	37033	4.28%	26533	26.53%

Abb 2: **Fragments Tab**
 Funktionelle Gruppen einer Teilmenge von Molekülen aus der COCONUT-Datenbank generiert mit dem ErtlFunctionalGroupsFinder: Zusätzlich zu 2D-Struktur und SMILES wird ein zufällig ausgewähltes Parent-Molekül angezeigt. Die Häufigkeiten der Fragmente der funktionellen Gruppen werden ausgewertet und können für Sortierzwecke verwendet werden.

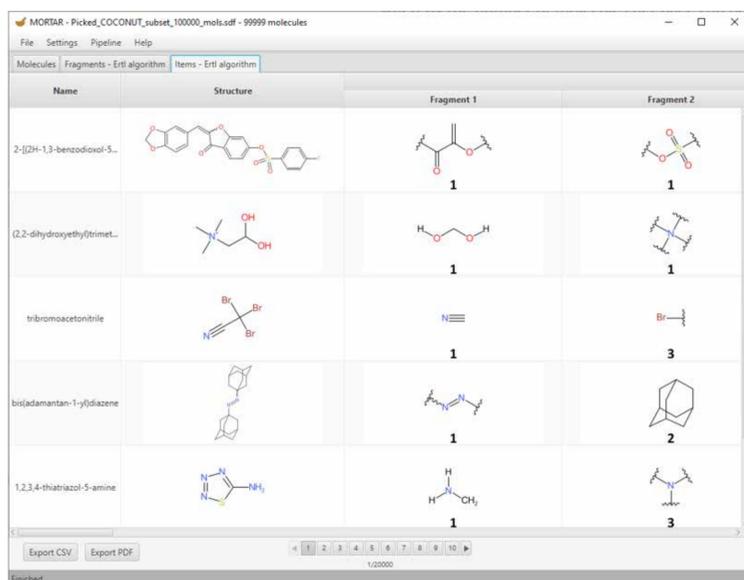


Abb 3: **Items Tab**
 Funktionelle Gruppen für jedes Molekül zusammen mit ihren Häufigkeiten. Die Registerkarten Fragmente und Elemente können sowohl als CSV-Datei als auch als PDF-Dokument exportiert werden. Während die CSV-Datei nur SMILES und Frequenzen enthält, zeigt die PDF-Datei zusätzlich die 2D-Strukturen, wie sie in der Ansicht erscheinen.

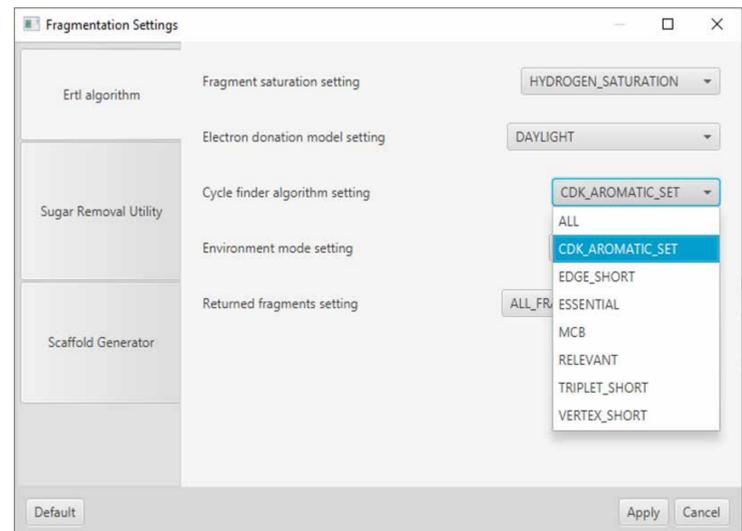


Abb 4: MORTAR ist als Plattform für Fragmentierungsmethoden konzipiert. Eine spezifische Schnittstelle ermöglicht eine vielseitige Integration von benutzerdefinierten Algorithmen. Die Schnittstellenimplementierung erzeugt eine Wrapper-Klasse, die automatisch einen Einstellungsreiter in der grafischen Benutzeroberfläche mit Dropdown-Menüs oder Textfeldern für benutzerdefinierte Parametereingaben konfiguriert.

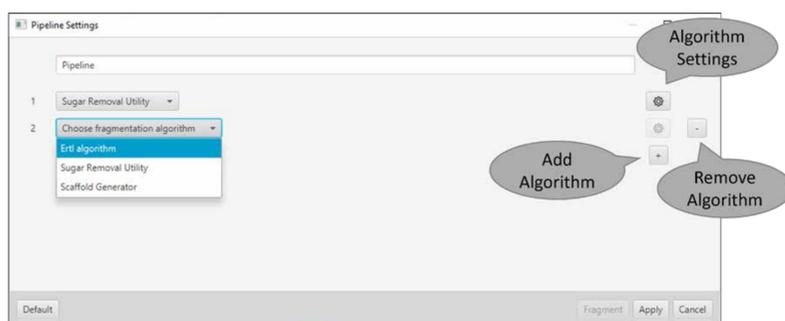


Abb 5: Neben der Ausführung einzelner Methoden können auch ganze Fragmentierungspipelines definiert und mit einer beliebigen Kombination der verfügbaren Fragmentierungsmethoden ausgeführt werden, wobei jede ausgewählte Methode ihre eigenen spezifischen Einstellungen hat.

Quellen

- [1] Fritsch, S., Neumann, S., Schaub, J. et al. ErtlFunctionalGroupsFinder: automated rule-based functional group detection with the Chemistry Development Kit (CDK). J Cheminform 11, 37
- [2] Schaub, J., Zielesny, A., Steinbeck, C. et al. Too sweet: cheminformatics for deglycosylation in natural products. J Cheminform 12
- [3] Schaub J, Zander J, Zielesny A, Steinbeck C. Scaffold Generator - A Java library implementing molecular scaffold functionalities in the Chemistry Development Kit (CDK). ChemRxiv. Cambridge: Cambridge Open Engage; 2022; This content is a preprint and has not been peer-reviewed.
- [4] MORTAR, <https://github.com/FelixBaensch/MORTAR>, Accessed 19 April 2022