



FACHINFORMATIONSDIENST
PHARMAZIE
TU Braunschweig



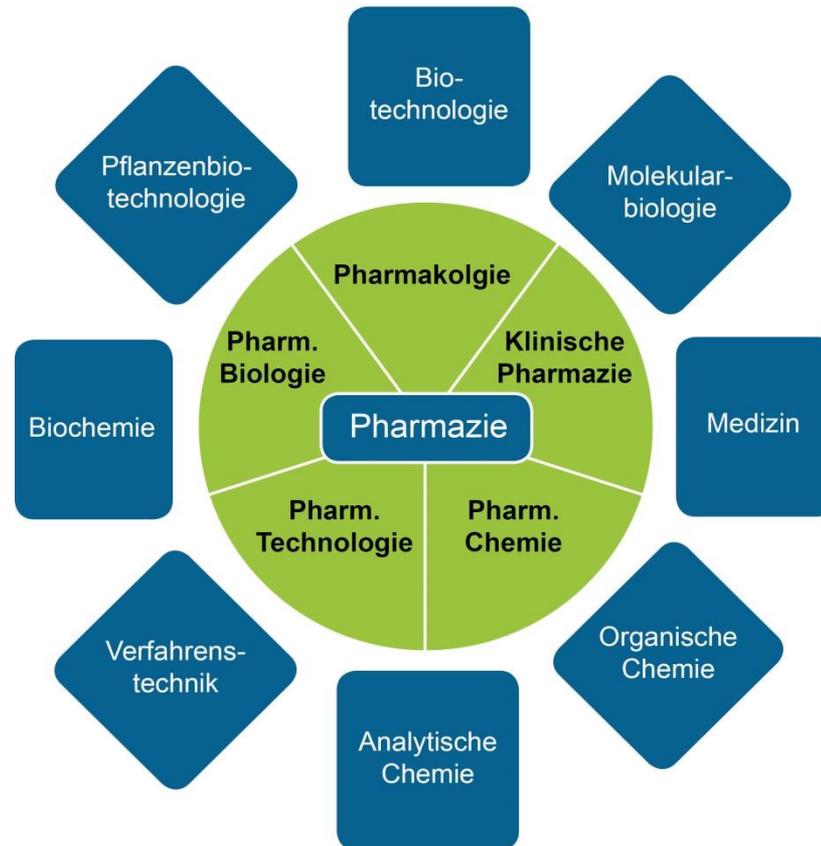
Integration einer Suche nach Molekülstrukturen

Kristof Keßler

VuFind-Anwendertreffen, Hamburg, 29.09.2017

Hintergrund

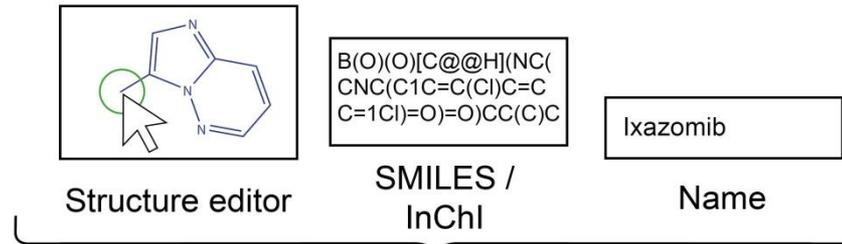
- Ausgeprägte Multidisziplinarität der Pharmazie
- Struktur biologisch aktiver Verbindungen maßgeblich in pharmazeutischer Chemie



Übersicht

Structure Search

Startpunkte
Nutzereingabe



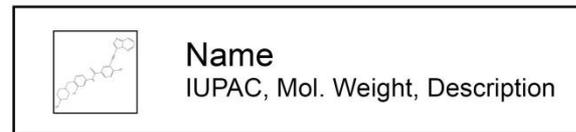
Verarbeitung externer
Quellen

Search

PubChem database
60 million structures

DrugBank database
9591 drug entries

Ergebnisausgabe



→ [PubChem](#)

→ [DrugBank](#)

→ [EPO Patents](#)

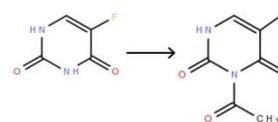
Search

Interaktions-
möglichkeiten

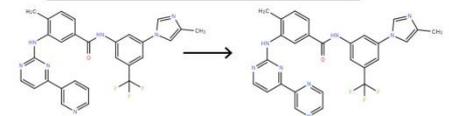
Search in PubPharm
for publications

- Drug therapy for lymphomas...
- A Phase 1 Study to Assess ...
- New Agents in Multiple Myeloma...

Substructure search



Similarity search
880 bit fingerprint,
Tanimoto score > 90



Integration in VuFind/beluga & Komponenten

- Definition einer Static Route <Modul>/Searchtools
- Aufruf externer Seite → Lose Integration → Frage: Interesse an einem derartigem Modul?
- Struktureditor:
 - Ketcher 2.0.0-alpha.3 von epam (GPL), auf Python-Basis
 - Indigo Toolkit 1.3.0 beta von epam (GPL), auf Python-Basis als Apache WSGI Prozess
- PubChem:
 - Datenbank chemischer Verbindungen der U.S. National Library of Medicine
 - PUG REST API, GET/POST Requests
- DrugBank:
 - Datenbank zugelassener Medikamente der University of Alberta
 - Durchsuchung eines über XSLT angepassten XML Download

Kurze Demo

www.pubpharm.de

Links

- epam Ketcher Struktureditor: <http://lifescience.opensource.epam.com/ketcher/>
- Indigo Toolkit: <http://lifescience.opensource.epam.com/indigo/>
- PUG REST:
 - Dokumentation: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/pug_rest/PUG_REST.html
 - Tutorial: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/pug_rest/PUG_REST_Tutorial.html
- DrugBank: <https://www.drugbank.ca/>



Struktursuche
Erweiterte Suche
Suchverlauf

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!