

# Integration einer Suche nach und mit Molekülstrukturen in PubPharm

Kristof Keßler

PubPharm, UB Braunschweig

Im Rahmen der beluga core Kooperation hat der FID Pharmazie das Rechercheportal PubPharm<sup>1</sup> entwickelt. Dieses wurde im September 2016 für die Öffentlichkeit zugänglich gemacht. Neben den üblichen Funktionen, die man von einem Discovery System erwartet, gibt es in der pharmazeutischen Forschung einige besondere Anforderungen. Hierzu gehört die Recherche nach Substanzen über deren chemische Struktur und auf Basis dieser der Suche nach entsprechenden Publikationen. Im Vortrag werde ich darüber berichten, wie eine Struktursuche auf Basis des Open Source Struktureditors Ketcher<sup>2</sup> unter Verwendung verschiedener externer Dienste, Datenquellen und Schnittstellen<sup>3</sup> implementiert und dann zunächst lose mit PubPharm verknüpft worden ist. Geplant ist die spätere engere Integration über die Nutzung eines Normdatenindizes.

1 <https://www.pubpharm.de/vufind/>

2 <http://lifescience.opensource.epam.com/ketcher/>

3 [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/pug\\_rest/PUG\\_REST.html](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/pug_rest/PUG_REST.html) / <https://www.drugbank.ca>