

Orbit Chemistry: Поиск и анализ молекул

База Orbit Chemistry, полностью интегрированная в платформу Orbit Intelligence, предназначена для поиска молекул в более чем 75 миллионах патентных документах. Простая в использовании, база поддерживает все типы поиска молекул, распознает все химические синонимы элементов и помогает быстро найти, где в семействе патентов упоминается интересующая вас молекула. В базе возможен поиск группы молекул, имеющих общее ядро, с помощью функции поиска по субструктуре или структурам Маркуша. База Orbit Chemistry также способна преобразовывать наименования в редактируемые структуры.

База Orbit Chemistry – это:

- Простой доступ к химической информации при чтении патента.
- Быстрая индексация патентов.
- Простое сочетание поиска молекул с высококачественной базой данных Orbit Intelligence (поиск по ключевым словам или по последовательностям).

Простое сочетание с названий, правовых статей и ключевых слов:

The screenshot displays the Orbit Chemistry search interface with the following sections:

- Molecules:** Search criteria include "and", "Sub-structure search" (with input "docetaxel"), and "Exact search" (with input "E.g.: acetaminophen").
- Names:** Search criteria include "Assignee (current - only latest)" (with input "sanofi") and fields for "Inventor" (E.g.: Fleming Alexander, Moyer Andrew) and "Representative" (E.g.: Baker Botts).
- Numbers, dates & country:** Search criteria include "Publ. number" (E.g.: EP0980063), "Date" (Priority, From 2015-01-01), and "Patents published in (patent authorities)" (E.g.: US, EP).

Простой импорт молекул:

The diagram illustrates the process of importing a molecule into the Marvin JS Editor:

- The search interface shows the input "drawn molecules" in the "Sub-structure search" field. A red box highlights the search icon, with a blue arrow pointing to the Marvin JS Editor.
- The Marvin JS Editor shows the chemical structure of a molecule (4-(4-hydroxyphenyl)acetamide) in the main workspace.
- The Marvin JS Editor also shows an "Import" dialog box with the "Open file" section selected, indicating the source of the molecule.

Useful link to download mol files:
<http://www.ebi.ac.uk/chebi/>
<https://www.drugbank.ca/>



Простое сочетание поисковых шагов:

Exact search

Search Step	Result(s)	Query	Assistant	Source	Action
5	28	2 NOT 3	Search history	FAMPAT	Show res
4	43	<Molecule search> AND ((PFIZER)/PA(OPA)) AND PRD >= 2015	Advanced search	FAMPAT	Show res
3	5738	<Molecule search> AND PRD >= 2015	Advanced search	FAMPAT	Show res
2	5766	<Molecule search> AND PRD >= 2015	Advanced search	FAMPAT	Show res
1	21827	<Molecule search>	Advanced search	FAMPAT	Show res

Sub-structure search



Cabazitaxel is investigated recently

28 results for 2 NOT 3 - Collection: FAMPAT

#	Title	Publication number	1st App. date	Applicant/Assignee	Relevance
1	Method for treating cancer using a combination of the damaging agents and an inhibitors	WO201769937	2016-09-30	VERTEX PHAR...	
2	Methods and compositions for anticancer therapies that target mena protein isoforms kinases	WO201800896	2017-07-07	METASTAT*	
3	Targeted liposomal gemtacin compositions and methods thereof	WO201719283	2017-05-04	L E A F HOLDI...	
4	Compositions and formulations including Cabazitaxel and human serum albumin	WO2017123760	2017-01-12	SUN QUN	
5	Acyl/Amide/Carbonyl linkers and their uses in specific conjugation of a cell-binding molecule	US2015322158	2015-07-15	SUZHOU M CO...	
6	Diazirine bridge linkers for conjugation of a cell-binding molecule	US2015314017	2015-07-15	SUZHOU M CO...	
7	Process for preparing amorphous Cabazitaxel	EP2938605	2013-12-18	SHILPA MEDIC...	

Возможна комбинация молекул. Удобный просмотр благодаря функции выделения цветом:

Sub-structure search: aspirin

Exact search: acetaminophen

Exact search: ibuprofen

Exact search: E.g.: acetaminophen

Fulltext view of a patent document showing a chemical structure of **IBUPROFEN** highlighted in red within the text.

Быстрая идентификация похожих структур благодаря поиску по субструктурам и расширенной функции выделения:

