

## Bases de données et outils en ligne utilisés dans l'article « Concevoir des candidats médicaments sur Internet » par Bruno Villoutreix

Base de données et logiciels en ligne	URLs	Références
<b>Reactome</b> : voies de signalisation...	<a href="https://reactome.org/">https://reactome.org/</a>	Jassal B et col., Nucleic Acids Res. 2020, 48(D1):D498-D503
<b>PubMed</b> : base de données bibliographiques	<a href="https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/">https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/</a>	
<b>Protein Data Bank</b> : structure 3D expérimentale des macromolécules	<a href="https://www.rcsb.org/">https://www.rcsb.org/</a>	Burley et col., Methods Mol Biol. 2017;1607:627-641
<b>Protein Databank in Europe</b> : structure 3D expérimentale des macromolécules	<a href="https://www.ebi.ac.uk/pdbe">https://www.ebi.ac.uk/pdbe</a>	Armstrong et col., Nucleic Acids Res. 2020, 48(D1):D335-D343.
<b>UniProt</b> : séquence des protéines...	<a href="https://www.uniprot.org/">https://www.uniprot.org/</a>	The uniprot consortium, Nucleic Acids Res. 2018, 46 : 2699.
<b>Swiss-Model</b> : modélisation de la structure 3D des protéines	<a href="https://swissmodel.expasy.org/">https://swissmodel.expasy.org/</a>	Waterhouse et col., Nucleic Acids Res. 46(W1), W296-W303 (2018)
<b>ModBase</b> : modélisation de la structure 3D des protéines	<a href="https://modbase.compbio.ucsf.edu/modbase-cgi/index.cgi">https://modbase.compbio.ucsf.edu/modbase-cgi/index.cgi</a>	Pieper et col., Nucleic Acids Res. 2014, 42(Database issue) : D336-46.
<b>OpenTargets platform</b> : structure l'information sur les cibles thérapeutiques	<a href="https://www.targetvalidation.org">https://www.targetvalidation.org</a>	Carvalho-Silva et col., Nucleic Acids Res. 2019, 47(D1) :D1056-D1065
<b>Pharos</b> : structure l'information sur les cibles thérapeutiques	<a href="https://pharos.nih.gov/">https://pharos.nih.gov/</a>	Sheils et col., Curr Protoc Bioinformatics. 2020, 69 : e92
<b>Therapeutic Target Database (TTD)</b> : structure l'information sur les cibles thérapeutiques	<a href="http://db.idrblab.org/ttd">http://db.idrblab.org/ttd</a>	Wang et col., Nucleic Acids Res. 2020
<b>PubChem</b> : petites molécules identifiées par criblage expérimental	<a href="https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/">https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/</a>	Kim et col., Nucleic Acids Res. 2019, 47(D1) : D1102-D1109
<b>ChEMBL</b> : petites molécules actives et inactives sur des cibles	<a href="https://www.ebi.ac.uk/chembl/">https://www.ebi.ac.uk/chembl/</a>	Mendez et col., Nucleic Acids Res. 2019, 47(D1) : D930-D940
<b>DrugBank</b> : médicaments sur le marché ou en phases cliniques	<a href="https://www.drugbank.ca/">https://www.drugbank.ca/</a>	Wishart et col., Nucleic Acids Res. 2018, 46(D1) : D1074-D1082
<b>Nubbe</b> : extraits de plantes du Brésil, biodiversité	<a href="http://nubbe.iq.unesp.br/portal/nubbe-search.html">http://nubbe.iq.unesp.br/portal/nubbe-search.html</a>	Pilon et col., Sci Rep 2017, 7(1) : 7215.
<b>YaTCM</b> : médecine traditionnelle Chinoise	<a href="http://cadd.pharmacy.nankai.edu.cn/yatcm/home">http://cadd.pharmacy.nankai.edu.cn/yatcm/home</a>	Li et col., Comput Struct Biotechnol J. 2018, 16 : 600-610
<b>IMPPAT</b> : plantes médicinales, Inde	<a href="https://cb.imsc.res.in/imppat/">https://cb.imsc.res.in/imppat/</a>	Mohanraj et col., Sci Rep 2018, 8(1) : 4329

<b>DataWarrior</b> : logiciel à installer pour analyser les petites molécules	<a href="http://www.openmolecules.org/datawarrior/">http://www.openmolecules.org/datawarrior/</a>	Sander et col., J Chem Inf Model. 2015, 23, 55:460-73.
<b>Radar Web creation</b> : tutos DataWarrior	<a href="https://www.radarweb.fr/">https://www.radarweb.fr/</a>	
<b>GDB-17</b> : molécules virtuelles	<a href="http://gdb.unibe.ch/downloads/">http://gdb.unibe.ch/downloads/</a>	Ruddigkeit et col., J Chem Inf Model. 2012 Nov 26, 52:2864-75
<b>SwissSimilarity</b> : criblage virtuel basé sur la connaissance d'un ligand	<a href="http://www.swiss similarity.ch/">http://www.swiss similarity.ch/</a>	Zoete et col., J. Chem. Inf. Model. 2016, 56:1399-1404.
<b>MTiOpenScreen</b> : criblage virtuel utilisant la structure 3D de la cible	<a href="https://bioserv.rpbs.univ-paris-diderot.fr/services/MTiOpenScreen/">https://bioserv.rpbs.univ-paris-diderot.fr/services/MTiOpenScreen/</a>	Labbe et col., Nucleic Acids Res. 2015, 43(W1):W448-54 & Lagarde et col., Oncotarget. 2018, 9:32346-32361
<b>Chimera</b> : outil de graphisme moléculaire	<a href="https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/">https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/</a>	Pettersen et col., J Comput Chem. 2004, 25:1605-12