

Nom	Mots-clés	Description	Langage	Type d'accès : •En ligne (serveur web) •Lien pour télécharger •Demande à l'auteur	Référence	Contact
MolDesc	Molecular descriptors	SB&C Platform providing: Tool to compute molecular properties or ADMETox properties	Django, Docker, Python	Serveur web : <a href="https://sbc.icoa.fr">https://sbc.icoa.fr</a> <a href="http://moldesc.icoa.fr">http://moldesc.icoa.fr</a>		<a href="#">Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA)</a> pascal.bonnet@univ-orleans.fr
F2D	Fragments Kinase inhibitors	SB&C Platform providing: <i>in silico</i> fragment based drug design protocol to find new kinase inhibitors	Django, Docker, Python	Serveur web : <a href="https://sbc.icoa.fr">https://sbc.icoa.fr</a> <a href="http://frags2drugs.icoa.fr">http://frags2drugs.icoa.fr</a>	To be published	<a href="#">Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA)</a> pascal.bonnet@univ-orleans.fr
METAPREDICT	ADMETox	SB&C Platform providing: Tool to compute ADMETox properties based on QSAR models	Django, Docker, Python	Serveur web : <a href="https://sbc.icoa.fr">https://sbc.icoa.fr</a> <a href="http://metapredict.icoa.fr">http://metapredict.icoa.fr</a>	To be published	<a href="#">Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA)</a> pascal.bonnet@univ-orleans.fr
VSprep	Database preparation	A KNIME Workflow for the Preparation of Molecules for Virtual Screening	Knime and third party applications	On request	Gally, J.-M. ; Bourg, S. ; Fogha, J. ; Do Q.T. ; Aci-Sèche, S. ; Bonnet, P. VSprep: A KNIME workflow for the preparation of molecular databases for virtual screening <i>Current Medicinal Chemistry</i> <b>2019</b> , 26, 1. Gally, J.-M. ; Bourg, S. ; Do Q.T. ; Aci-Sèche, S. ; Bonnet, P. VSprep: A general KNIME workflow for the preparation of molecules for virtual screening <i>Molecular Informatics</i> <b>2017</b> , 36, 1700023.	<a href="#">Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA)</a> pascal.bonnet@univ-orleans.fr
Kinomine	Kinases Crystal structures Activity Selectivity	SB&C Platform providing: A tool to search and extract chemical and biological kinase knowledge	Django, Docker, Python	Serveur web : <a href="https://sbc.icoa.fr">https://sbc.icoa.fr</a> <a href="http://kinomine.icoa.fr">http://kinomine.icoa.fr</a>	To be published	<a href="#">Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA)</a> pascal.bonnet@univ-orleans.fr
LEA3D	de novo drug design virtual screening using functions such as: docking (PLANTS program), shape similarity (SENSAAS program) and/or molecular properties	Outil de criblage virtuel et de design de petites molécules		Serveur web : <a href="https://chemoinfo.ipmc.cnrs.fr/LEA3D">https://chemoinfo.ipmc.cnrs.fr/LEA3D</a>	Douguet D., e-LEA3D: a computational-aided drug design web server, <i>Nucleic Acids Res.</i> , <b>2010</b> , 38, Suppl:W615-21. <a href="https://doi.org/10.1093/nar/gkq322">doi:10.1093/nar/gkq322</a>	<a href="#">Institut de Pharmacologie Moléculaire et Cellulaire (IPMC)</a> douguet@ipmc.cnrs.fr
SENSAAS	Molecular alignment Molecular similarity Shape similarity	Alignment moléculaire basé sur la forme 3D	Python3.7	Serveur web : <a href="https://chemoinfo.ipmc.cnrs.fr/SENSAAS">https://chemoinfo.ipmc.cnrs.fr/SENSAAS</a> Demande des codes sources aux auteurs	Douguet D. and Payan F., SENSAAS: Shape-based Alignment by Registration of Colored Point-based Surfaces, <i>Molecular Informatics</i> , <b>2020</b> , 8, 2000081. <a href="https://doi.org/10.1002/minf.202000081">doi:10.1002/minf.202000081</a>	<a href="#">Institut de Pharmacologie Moléculaire et Cellulaire (IPMC)</a> douguet@ipmc.cnrs.fr

Nom	Mots-clés	Description	Langage	Type d'accès : •En ligne (serveur web) •Lien pour télécharger •Demande à l'auteur	Référence	Contact
@TOME V3	<i>Comparative modeling Ligand interactions</i>	A pipeline for comparative modeling of protein-ligand complexes		Serveur web : <a href="http://atome.cbs.cnrs.fr/ATOME_V3">http://atome.cbs.cnrs.fr/ATOME_V3</a>	Pons JL and Labesse G, <i>Nucleic Acids Research</i> , <b>2009</b> . doi:10.1093/nar/gkp368	<a href="#">Centre de Biochimie Structurale (CBS)</a> labesse@cbs.cnrs.fr
EDMON V3	<i>Nuclear hormone receptors endocrine-disrupting chemicals interactions</i>	Tool to estimate binding affinities		Serveur web : <a href="http://atome.cbs.cnrs.fr/ATOME_V3/SERVER/EDMon_v3.html">http://atome.cbs.cnrs.fr/ATOME_V3/SERVER/EDMon_v3.html</a>	Delfosse et al., <i>PNAS</i> , <b>2012</b> . doi:10.1073/pnas.1203574109	<a href="#">Centre de Biochimie Structurale (CBS)</a> labesse@cbs.cnrs.fr
CoSiAn	<i>2D and 3D molecular similarity</i>	Combinatorial similarity analysis		Serveur web : <a href="http://cosian.cbs.cnrs.fr">http://cosian.cbs.cnrs.fr</a>		<a href="#">Centre de Biochimie Structurale (CBS)</a> labesse@cbs.cnrs.fr
IChem Shaper / Shaper2 SiteAlign FuzCav FingerPrintLib pymolFP Fresno	<i>Protein-ligand interactions Shape-based alignment of pharmacophore-annotated VolSite cavities Interaction fingerprints Scoring function</i>			Lien pour télécharger : <a href="http://bioinfo-pharma.u-strasbg.fr/labwebsite/download.html">http://bioinfo-pharma.u-strasbg.fr/labwebsite/download.html</a>		<a href="#">Laboratoire d'Innovation Thérapeutique (LIT)</a> rognan@unistra.fr
Chem-REST	<i>Chemical databases, REST protocole, Datasets for machine learning models</i>	Chemical Repository of Existing Structures and their computed properTies		Serveur web : <a href="https://chem-rest.pasteur.fr/">https://chem-rest.pasteur.fr/</a>		<a href="#">Institut Pasteur - Structural Bioinformatics - Chemoinformatics and proteochemometric</a> olivier.sperandio@pasteur.fr
Frog AMMOS MTiOpenScreen	<i>Conformer generation Energy minimization of protein-ligands complexes Docking Virtual screening</i>	Services at RPBS Web Portal		Serveur web : <a href="https://bioserv.rpbs.univ-paris-diderot.fr/services.html#drugs-protein_inter">https://bioserv.rpbs.univ-paris-diderot.fr/services.html#drugs-protein_inter</a>	Labbé CM et al., MTiOpenScreen: a web server for structure-based virtual screening. <i>Nucleic Acids Res.</i> <b>2015</b> , 43(W1):W448-54. doi: 10.1093/nar/gkv306 Lagarde N et al., Online structure-based screening of purchasable approved drugs and natural compounds: retrospective examples of drug repositioning on cancer targets. <i>Oncotarget.</i> <b>2018</b> 17;9(64):32346-32361. doi: 10.18632/oncotarget.25966 Labbé CM et al., AMMOS2: a web server for protein-ligand-water complexes refinement via molecular mechanics. <i>Nucleic Acids Res.</i> <b>2017</b> , 45(W1):W350-W355. doi:10.1093/nar/gkx397	<a href="#">Unité de Biologie Fonctionnelle et Adaptative (BFA)</a> pierre.tuffery@univ-paris-diderot.fr <a href="#">Chimie médicinale et recherche translationnelle</a> maria.miteva@inserm.fr

Nom	Mots-clés	Description	Langage	Type d'accès : •En ligne (serveur web) •Lien pour télécharger •Demande à l'auteur	Référence	Contact
ISIDA S4MPLE	<i>Molecular descriptors</i> <i>QSPR model builder</i> <i>Generative</i> <i>Topographics Map</i> <i>(GTM)</i> <i>Flexible docking and</i> <i>peptide folding</i> <i>Reactivity analysis</i> <i>Prediction tools</i> <i>(physico-chemical</i> <i>properties, REACH</i> <i>endpoints)</i>	ISIDA Package is a suite of cheminformatics tools	Python, C	Lien pour télécharger : <a href="https://complex-matter.unistra.fr/equipes-de-recherche/laboratoire-de-chemoinformatique/software-development/">https://complex-matter.unistra.fr/equipes-de-recherche/laboratoire-de-chemoinformatique/software-development/</a> Serveur web : <a href="https://complex-matter.unistra.fr/equipes-de-recherche/laboratoire-de-chemoinformatique/web-services/">https://complex-matter.unistra.fr/equipes-de-recherche/laboratoire-de-chemoinformatique/web-services/</a>	Lagorce D, Bouzlama L, Becot J, Miteva MA, Villoutreix BO. <i>Bioinformatics</i> . <b>2017</b> Nov 15;33(22):3658-3660. <a href="https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btx491">doi:10.1093/bioinformatics/btx491</a>	<a href="#">Laboratoire de Chémoinformatique</a> varnek@unistra.fr
FAF-Drugs4	<i>Drug design</i> <i>Free ADME-Tox</i> <i>Filtering Tool</i>	Préparation de chimiothèques	Python, C	Serveur web : <a href="http://fafdrugs4.mti.univ-paris-diderot.fr/">http://fafdrugs4.mti.univ-paris-diderot.fr/</a>	Lagorce D, Bouzlama L, Becot J, Miteva MA, Villoutreix BO. <i>Bioinformatics</i> . <b>2017</b> Nov 15;33(22):3658-3660. <a href="https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btx491">doi:10.1093/bioinformatics/btx491</a>	<a href="#">NeuroDiderot</a> Bruno.villoutreix@inserm.fr