

Création des fichiers pour le parseur de

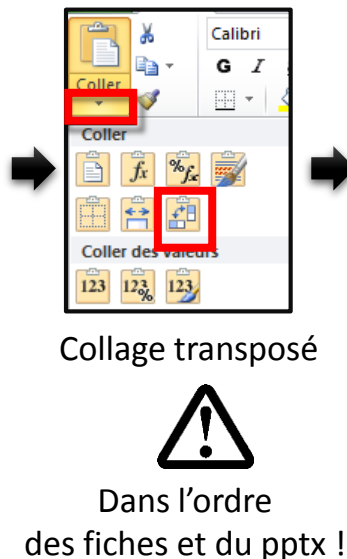
MedChem Structure Genius



1

Compilation des fiches dans 1 même onglet

	C	D	E
1	Champ	FR	EN
2	Molécule	moxifloxacin	moxifloxacin
3	Structure	moxifloxacin.png	moxifloxacin.png
4	Structure_Help	moxifloxacin_Help.png	moxifloxacin_Help.png
5	Structure_Full	moxifloxacin_Full.png	moxifloxacin_Full.png
6	Structure smile	<chem>COc1c(N2C[C@@H]3CCCN[C@@H]3C2)c(F)c4C(=O)C(=CN(C5CC5)c14)C(=O)O</chem>	<chem>COc1c(N2C[C@@H]3CCCN[C@@H]3C2)c(F)c4C(=O)C(=CN(C5CC5)c14)C(=O)O</chem>
7	DCI_Help	4-oxo-quinoline-3-carboxylic acid	4-oxo-quinoline-3-carboxylic acid
8	Prodrogue		
9	Niveau	2	2
10	ATC Code	J01MA14	J01MA14
11	Classe	Fluoroquinolones	Fluoroquinolones
12	Classe synonyme	Fluoroquinolones	Fluoroquinolones
13	MdA	Inhibiteur	Inhibitor
14	Cible acronyme	Topoisomerase II	Topoisomerase II
15	Cible	ADN gyrase bactérienne	bacterial DNA gyrase
16	Indication	Infections bactériennes, dont infecti	Bacterial infections, including urinary tract
17	Aire thérapeutique	INFECTIO	INFECTIO
18	Spécialités	Avelox, Avalox, Avelon, Vigamox, M	Avelox, Avalox, Avelon, Vigamox, Moxeza
19	Année d'approbation	1999(FDA)	1999(FDA)
20	Statut orphelin		
21	Compagnie	Bayer	Bayer
22	ChEMBL	https://www.ebi.ac.uk/chembl/db/in	https://www.ebi.ac.uk/chembl/db/index.p
23	DrugBank	http://www.drugbank.ca/drugs/DB01	http://www.drugbank.ca/drugs/DB00218
24	Wikipedia	https://en.wikipedia.org/wiki/Moxif	https://en.wikipedia.org/wiki/Moxifloxaci
25	CAS Number	354812-41-2	354812-41-2
26	ChemSpider	http://www.chemspider.com/Chem	http://www.chemspider.com/Chemical-S
27	Commentaire		
28	Sous-structure	quinolone, ceto-acide	quinolone, keto-acid



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	Champ	Molécule	Structure	Structure_Help	Structure_Full	Structure smile				
2	FR	moxifloxacin	moxifloxacin.png	moxifloxacin_Help.png	moxifloxacin_Full.png	<chem>COc1c(N2C[C@@H]3CCCN[C@@H]3C2)c(F)c4C(=O)C(=CN(C5CC5)c14)C(=O)O</chem>	4-oxo-quinoline-3-carbox		2	J01MA14
3	EN	moxifloxacin	moxifloxacin.png	moxifloxacin_Help.png	moxifloxacin_Full.png	<chem>COc1c(N2C[C@@H]3CCCN[C@@H]3C2)c(F)c4C(=O)C(=CN(C5CC5)c14)C(=O)O</chem>	4-oxo-quinoline-3-carbox		2	J01MA14
4	FR	ciprofloxacin	ciprofloxacin.png	ciprofloxacin_Help.png	ciprofloxacin_Full.png	<chem>(=O)C1=CN(C2CC2)c3cc(N4CCNCC4)c(F)cc3C1=O</chem>	4-oxo-quinoline-3-carbox		1	J01MA02
5	EN	ciprofloxacin	ciprofloxacin.png	ciprofloxacin_Help.png	ciprofloxacin_Full.png	<chem>(=O)C1=CN(C2CC2)c3cc(N4CCNCC4)c(F)cc3C1=O</chem>	4-oxo-quinoline-3-carbox		1	J01MA02



Mise en forme de la feuille de

② compilation

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
	Champ	Molecule	Structure	Structure_Help	Structure_Full	Structure_smile	DCI_Help	Prodrogue	Niveau	ATC Code
1										
2	FR	moxifloxacin	moxifloxacin.png	moxifloxacin_Help.png	moxifloxacin_Full.png	<chem>COc1c(N2C[C@@H]3CCN[C@@H]3C2)c(F)cc4C(=O)C(=CN(C5CC5)c14)C(=O)O</chem>	4-oxo-quinoline-3-carbox			2 J01MA14
3	EN	moxifloxacin	moxifloxacin.png	moxifloxacin_Help.png	moxifloxacin_Full.png	<chem>COc1c(N2C[C@@H]3CCN[C@@H]3C2)c(F)cc4C(=O)C(=CN(C5CC5)c14)C(=O)O</chem>	4-oxo-quinoline-3-carbox			2 J01MA14
4	FR	ciprofloxacin	ciprofloxacin.png	ciprofloxacin_Help.png	ciprofloxacin_Full.png	<chem>(=O)C1=CN(C2CC2)c3cc(N4CCNCC4)c(F)cc3C1=O</chem>	4-oxo-quinoline-3-carbox			1 J01MA02
5	EN	ciprofloxacin	ciprofloxacin.png	ciprofloxacin_Help.png	ciprofloxacin_Full.png	<chem>(=O)C1=CN(C2CC2)c3cc(N4CCNCC4)c(F)cc3C1=O</chem>	4-oxo-quinoline-3-carbox			1 J01MA02



	A	B	C	D	E	F	G	H	I
	Champ	Molecule	Structure	Structure_Help	Structure_Full	Structure_smile	DCI_Help	Prodrogue	Niveau
1									
2	FR	moxifloxacin	moxifloxacin.png	moxifloxacin_Help.png	moxifloxacin_Full.png	<chem>COc1c(N2C[C@@H]3CCN[C@@H]3C2)c(F)cc4C(=O)C(=CN(C5CC5)c14)C(=O)O</chem>	4-oxo-quinoline-3-carbox		
3	EN	moxifloxacin	moxifloxacin.png	moxifloxacin_Help.png	moxifloxacin_Full.png	<chem>COc1c(N2C[C@@H]3CCN[C@@H]3C2)c(F)cc4C(=O)C(=CN(C5CC5)c14)C(=O)O</chem>	4-oxo-quinoline-3-carbox		
4	FR	ciprofloxacin	ciprofloxacin.png	ciprofloxacin_Help.png	ciprofloxacin_Full.png	<chem>(=O)C1=CN(C2CC2)c3cc(N4CCNCC4)c(F)cc3C1=O</chem>	4-oxo-quinoline-3-carbox		
5	EN	ciprofloxacin	ciprofloxacin.png	ciprofloxacin_Help.png	ciprofloxacin_Full.png	<chem>(=O)C1=CN(C2CC2)c3cc(N4CCNCC4)c(F)cc3C1=O</chem>	4-oxo-quinoline-3-carbox		

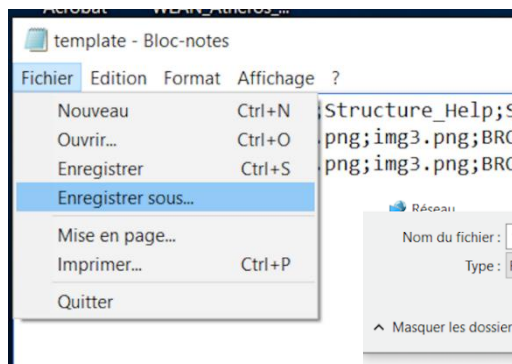
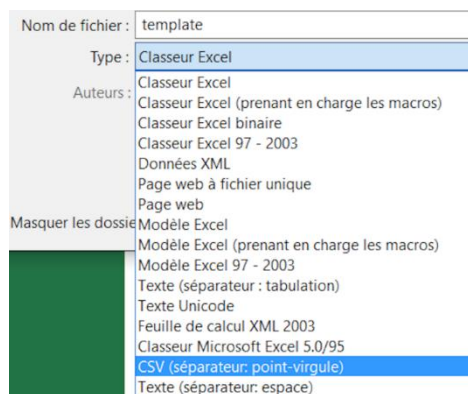


3

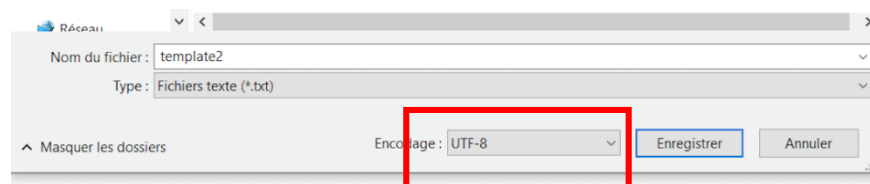
Création du fichier CSV pour le parseur encodé au format UTF8 sur Windows

1/ Après avoir travaillé le fichier sur Excel, l'enregistrer en choisissant « Enregistrer sous » puis le type « CSV (séparateur point-virgule) » avec comme nom pour notre exemple « template.csv »

2/ Ouvrir le fichier « template.csv » via le Bloc Note.
3/ Dans le Bloc Note, sans modifier le contenu,
- Renommer le fichier
- Sélectionner « Enregistrer sous »
- Choisissez le type « Tous les fichiers »
- L'encodage « UTF-8 »



Le fichier que vous venez de créer est celui à insérer dans le parseur !



4

Création des images (hors molécule seule car normalement déjà créées en préparant les slides)-1

Créer un nouvel onglet en copiant le nom des images

1/ de la classe

2/ des structures (Help et Full)

Attention respecter l'ordre du pptx!!!

1	Champ	FR
2	Molécule	nalidixic acid
3	Structure	nalidixic_acid.png
4	Structure_Help	nalidixic_acid_Help.png
5	Structure_Full	nalidixic_acid_Full.png
6	Structure smile	CCN1C=C(C(=O)O)C(=O)c2ccc(C)nc12
7	DCI_Help	quinolone

3/ dans « remplacer », remplace « .png » par rien pour supprimer l'extension de fichier

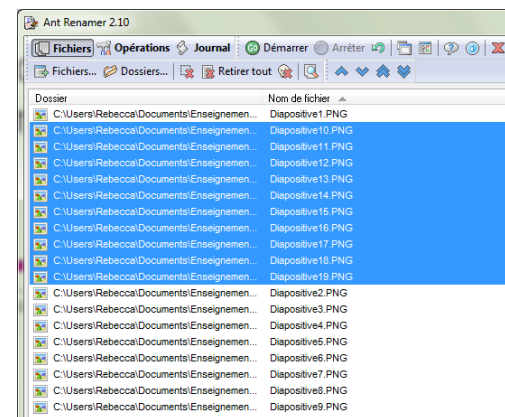
	A
1	Fluoroquinolones
2	nalidixic_acid_Help
3	nalidixic_acid_Full
4	ofloxacin_Help
5	ofloxacin_Full
6	ciprofloxacin_Help
7	ciprofloxacin_Full
8	levofloxacin_Help
9	levofloxacin_Full
10	pefloxacin_Help
11	pefloxacin_Full
12	enoxacin_Help
13	enoxacin_Full
14	norfloxacin_Help
15	norfloxacin_Full
16	moxifloxacin_Help
17	moxifloxacin_Full
18	gemifloxacin_Help
19	gemifloxacin_Full
20	

4/ enregistrer l'onglet en .txt (tabulation)

5/ enregistrer la presentation pptx en image png (toutes) un dossier est créé avec les images dans l'ordre des diapos nommées diapositive 1, diapositive 2, ...

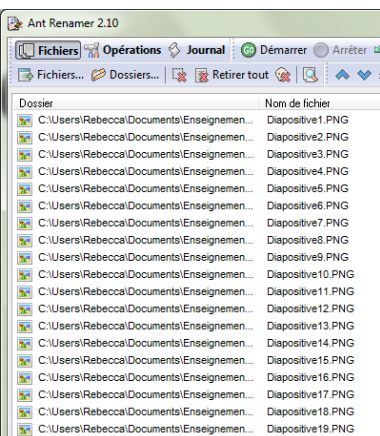
Présentation PowerPoint
 Présentation PowerPoint prenant en charge les macros
 Présentation PowerPoint 97-2003
 PDF
 Document XPS
 Modèle PowerPoint
 Modèle PowerPoint prenant en charge les macros
 Modèle PowerPoint 97-2003
 Thème Office
 Diaporama PowerPoint
 Diaporama PowerPoint prenant en charge les macros
 Diaporama PowerPoint 97-2003
 Complément PowerPoint
 Complément PowerPoint 97-2003
 Présentation XML PowerPoint
 Vidéo MPEG-4
 Windows Media Video
 Format GIF
 Format JPEG
 Format PNG
 Format TIFF
 Bitmap indépendante du périphérique
 Métafichier Windows
 Métafichier Windows amélioré
 Plan/RTF
 Présentation de l'image PowerPoint
 Présentation Open XML Strict
 Présentation OpenDocument

6/ Ouvrir Ant Renamer et charger les fichiers à renommer
 Remettre dans l'ordre les diapositives si nécessaire!!!!

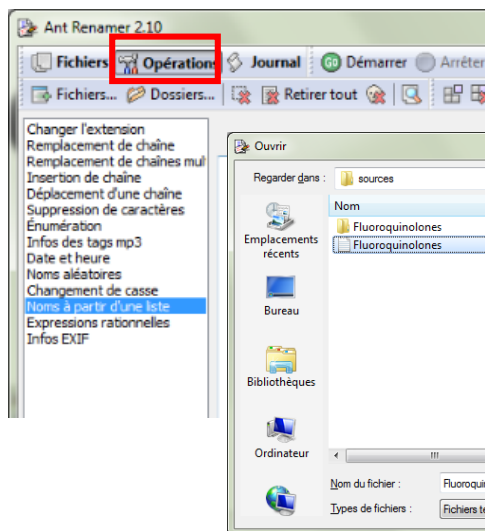


Création des images (hors molécule seule car 4 normalement déjà créées en préparant les slides)-2

7/ Vérifier l'ordre des diapos

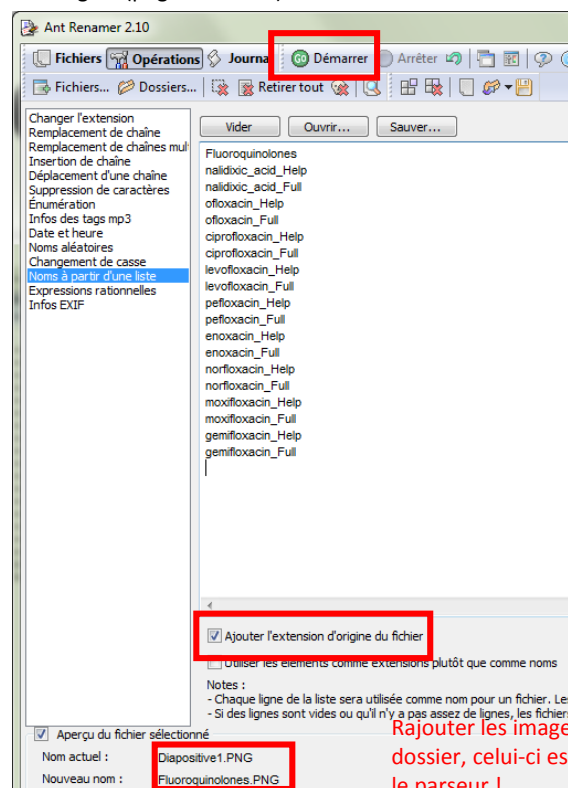


8/ Cliquer sur opérations et Noms à partir d'une liste et chercher votre fichier txt

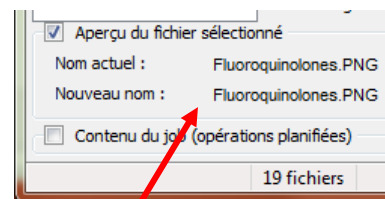


9/ Cliquer sur GO

Attention vérifier que l'extension d'origine (png est incluse)



10/ vérifier dans le dossier que les nouveaux noms correspondent bien



Rajouter les images des molécules seules dans le dossier, celui-ci est prêt à être importer en batch dans le parseur !

