

Neurosnap Platformで利用可能なバイオインフォマティクスツールのリスト

Neurosnap Platformは構造生物学研究に役立つ多くの解析パッケージをサポートしています。

• NeuroFold

メーカー独自のモデルでモノマー酵素の熱安定性、pH安定性、反応速度を最適化できます。*専用ライセンスが必要

論文（外部サイト）：<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2024.03.12.584504v1>

• AlphaFold2

ColabFold モデルを使用してタンパク質構造を予測します。

論文（外部サイト）：<https://www.nature.com/articles/s41586-021-03819-2>

• DiffDock-L

タンパク質ターゲットへのリガンドの結合を予測します。

論文（外部サイト）：<https://arxiv.org/abs/2402.18396>

• RFdiffusion-v2

条件情報（モチーフ、ターゲットなど）の有無にかかわらずタンパク質構造を予測します。

論文（外部サイト）：<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2022.12.09.519842v2>

• ColabDock

AlphaFold2 の特殊バージョンを使用して、タンパク質をタンパク質にドッキングします。

論文（外部サイト）：<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2023.07.04.547599v1>

• RoseTTAFold2

AlphaFold2 よりも高速で、モノマーに対してより正確なタンパク質構造予測ツール。

論文（外部サイト）：<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2023.05.24.542179v1>

• RoseTTAFold All-Atom

DNA-タンパク質複合体、タンパク質-タンパク質複合体、タンパク質-低分子複合体を予測します。

論文（外部サイト）：<https://www.science.org/doi/10.1126/science.adl2528>

• LightDock

タンパク質をペプチド、DNA、その他のタンパク質とドッキングすることができます。

論文（外部サイト）：<https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btx555>

• Haddock 3*

タンパク質、DNA、ペプチド、抗原、抗体など、さまざまなタイプのドッキングと評価ができます。

論文（外部サイト）：<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja026939x>

• ESMFold

アミノ酸配列を使用してタンパク質構造を予測します。

論文（外部サイト）：<https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.ade2574>

• LigandMPNN

タンパク質構造のアミノ酸だけでなく、特定の鎖や複合体も予測できる逆フォールディングモデルです。

論文（外部サイト）：<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2023.12.22.573103v1>

• AntiFold

抗体、ナノボディ、抗原抗体複合体のアミノ酸を予測します。

論文（外部サイト）：<https://arxiv.org/abs/2405.03370>

*ベータ版



- **ABACUS-R***

エンコーダー/デコーダーを使用して、局所的な3次元構造環境を基に配列を予測します。

論文（外部サイト）：<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/38177863/>

- **NetSolP-1.0**

アミノ酸配列からタンパク質の溶解性や発現・有用性を正確に予測します。

論文（外部サイト）：<https://academic.oup.com/bioinformatics/article/38/4/941/6444984>

- **ESM-IF1**

入力されたタンパク質構造のalternative sequencesを高精度で予測します。

論文（外部サイト）：<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2022.04.10.487779v2>

- **MIF-ST**

入力されたタンパク質構造のalternative sequencesを高精度で予測します。

論文（外部サイト）：<https://doi.org/10.1101/2022.05.25.493516>

- **ProGen2**

入力されたアミノ酸配列から、De novoタンパク質とタンパク質バリエーションを生成します。

論文（外部サイト）：<https://arxiv.org/abs/2206.13517>

- **AfCycDesign**

AlphaFold2 のパワーを活用して大環状ペプチドの正確な設計を容易にします。

論文（外部サイト）：<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2023.02.25.529956v1>

- **AF2Bind**

AlphaFold2 のペアワイズ表現を利用して小分子の結合部位を予測します。

論文（外部サイト）：<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2023.10.15.562410v1>

- **ScanNet Protein Binding Site Prediction**

タンパク質-タンパク質およびタンパク質-抗体結合部位を予測するための深層学習モデル。

論文（外部サイト）：<https://www.nature.com/articles/s41592-022-01490-7>

- **Afcluster**

配列の類似性に基づくサンプルのクラスタリング。

論文（外部サイト）：<https://www.nature.com/articles/s41586-023-06832-9>

- **CombFold***

サブユニットの配列から大きなタンパク質複合体の構造を予測します。

論文（外部サイト）：<https://www.nature.com/articles/s41592-024-02174-0>

- **TIsigner Expression Optimization**

タンパク質発現を最適化するためのヌクレオチド配列ベースのメソッド。

論文（外部サイト）：<https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1009461>

- **SoDoPE Solubility Optimization**

タンパク質の溶解性を迅速かつ正確に最適化します。

論文（外部サイト）：<https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btaa578>

- **Razor Signal Peptide Detection**

シグナルペプチドの検出。

論文（外部サイト）：<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2020.11.30.405613v2>

- **WoLF PSORT Protein Localization**

アミノ酸配列から細胞内局在部位を予測します。

論文（外部サイト）：https://academic.oup.com/nar/article/35/suppl_2/W585/2920788

*ベータ版

- **ProtNLM**

アミノ酸配列の名前と機能のアノテーションを予測します。

- **ESM-2 for PTMs**

配列から潜在的な翻訳後修飾部位を予測します。

論文（外部サイト）：<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2023.11.13.566930v1>

- **nzBert E.C. Prediction**

シーケンスから酵素クラスを予測します。

論文（外部サイト）：<https://academic.oup.com/bioinformatics/article/39/10/btad620/7329097>

- **DeepTM Transmembrane Topology**

α ヘリックス、 β バレルタンパク質のトポロジーを検出し、予測します。

論文（外部サイト）：<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2022.04.08.487609v1>

- **EvoProtGrad Protein Evolution**

変異させる残基を特定します。

論文（外部サイト）：<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2632-2153/accacd>

- **ClusterProt**

構造情報を使用して同じ長さのタンパク質をクラスタリングします。

論文（外部サイト）：<https://arxiv.org/abs/1802.03426>

- **DLKcat Kcat Prediction***

標的タンパク質と選択された化合物との間のKcatを予測します。

論文（外部サイト）：<https://www.nature.com/articles/s41929-022-00798-z>

- **TemStaPro Protein Thermostability Prediction**

40 °C から 65 °C までのタンパク質の熱安定性を予測します。

論文（外部サイト）：<https://academic.oup.com/bioinformatics/article/40/4/btae157/7632735>

- **eTox Drug Toxicity Prediction**

低分子量有機薬物の毒性と合成アクセシビリティを迅速に予測します。

論文（外部サイト）：<https://bmcpharmacoltoxcol.biomedcentral.com/articles/10.1186/s40360-018-0282-6>

- **ToxinPred Peptide Toxicity Prediction**

アミノ酸配列からペプチドの毒性を正確に予測します。

論文（外部サイト）：<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2023.08.11.552911v1>

- **AlphaFlow**

実験条件や生理学的条件を忠実に反映したタンパク質構造を生成します。

論文（外部サイト）：<https://arxiv.org/abs/2402.04845>

- **AMBER Relaxation**

タンパク質構造を緩和します。

論文（外部サイト）：<https://www.nature.com/articles/s41592-022-01488-1>

- **GROMACS Molecular Dynamics***

さまざまな溶液中のタンパク質と酵素を分子動力学シミュレーションします。

論文（外部サイト）：<https://doi.org/10.1016/j.softx.2015.06.001>

- **DockQ**

ネイティブ構造と予測構造を使用して、タンパク質間ドッキング モデルの品質を評価します。

論文（外部サイト）：<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC4999177/>

*ベータ版



- **DynamicBind***

リガンド固有のタンパク質-リガンド複合体の構造を予測します。

論文 (外部サイト) : <https://www.nature.com/articles/s41467-024-45461-2>

- **PocketFlow**

ターゲットタンパク質の結合ポケットに対するリガンドを生成します。

論文 (外部サイト) : <https://www.nature.com/articles/s42256-024-00808-8>

- **Protein Fold Stability Prediction**

タンパク質の安定性を予測します。

論文 (外部サイト) : <https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2024.03.14.584940v1>

- **Foldseek Structural Clustering***

構造と配列の特徴を組み合わせてタンパク質構造をクラスター化し検索パラメータをほぼ完全に制御できます。

論文 (外部サイト) : <https://www.nature.com/articles/s41587-023-01773-0>

- **Foldtree**

構造ベースのアプローチを使用して系統樹を生成します。

論文 (外部サイト) : <https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2023.09.19.558401v1>

- **EpHod Optimal Enzyme pH Prediction**

タンパク質配列から酵素の最適 pH を予測します。

論文 (外部サイト) : <https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2023.06.22.544776v1>

- **AutoDock-SS***

タンパク質構造に基づいて薬剤のコンフォーメーションを動的に最適化し、評価のために薬剤のコンフォーメーションを正確に表現します。

論文 (外部サイト) : <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jcim.4c00136>

- **Immune Builder***

配列から抗体、ナノボディ、T 細胞受容体を設計します。

論文 (外部サイト) : <https://www.nature.com/articles/s42003-023-04927-7>

- **DiffAb Antibody Design**

抗原構造から抗原特異的な抗体を設計します。

論文 (外部サイト) : <https://openreview.net/forum?id=jSorGn2Tjg>

- **PDBFixer**

分子シミュレーション用のタンパク質構造ファイルを準備および修復するために使用します。

論文 (外部サイト) : <https://github.com/openmm/pdbfixer>

- **PDB2PQR**

PDB ファイルを PQR 形式に変換することやPDB ファイルの一般的な問題を修正するために使用します。

論文 (外部サイト) : <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/15215472/>

- **AutoDock Vina (smina)**

AutoDock Vinaから派生したもので、分子ドッキングシミュレーションのための追加機能と改良を提供するように設計されています。

論文 (外部サイト) : <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ci300604z>

- **Conformer Generator**

RDKitライブラリを用いた分子コンフォーマーの生成、最適化、解析のために設計されています。

論文 (外部サイト) : <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/26575315/>

2024年10月1日作成

本サービスの仕様は、事前の予告なく変更される場合があります。

*ベータ版

