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。

- **NeuroBind**

メーカー独自のモデルで任意のタンパク質または複雑な標的に対する抗体、ナノボディ、scFv、ペプチドの設計。

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

- **Boltz-1**

AlphaFold3 レベルの精度で生体分子複合体構造を予測。
論文（外部サイト）：https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2024.11.19.624167v1

- **Chai-1**

AlphaFold3 レベルの精度で生体分子複合体構造を予測。
論文（外部サイト）：https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2024.10.10.615955v2

- **Protenix**

AlphaFold3 レベルの精度で生体分子複合体構造を予測。

- **GNINA**

CNNを統合してタンパク質とリガンドの結合予測の精度を高めるオープンソースの分子ドッキングツール。
論文（外部サイト）： https://jcheminf.biomedcentral.com/articles/10.1186/s13321-021-00522-2

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

- **DiffDock-L**

タンパク質ターゲットへのリガンドの結合を予測。
論文（外部サイト）：https://arxiv.org/abs/2402.18396

- **RFantibody**

原子レベルの精度でde novo抗体およびナノボディ（VHH）を生成。
論文（外部サイト）：https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2024.03.14.585103v2

- **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。
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。
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。
論文（外部サイト）：https://www.science.org/doi/10.1126/science.adl2528

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

- **EvoEF2**

タンパク質の安定性評価や結合エネルギーを計算。
論文（外部サイト）：https://academic.oup.com/bioinformatics/article/36/4/1135/5582267

- **EvoEF2 Mutant Stability Analysis**

EvoEF2エネルギー関数を用いて変異体がタンパク質の安定性に与える影響を分析。
論文（外部サイト）：https://academic.oup.com/bioinformatics/article/36/4/1135/5582267

- **QEPPI**

タンパク質間相互作用（PPI）を標的とする化合物に特化した薬物類似性を定量的に評価。
論文（外部サイト）：https://www.mdpi.com/1422-0067/22/20/10925

- **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。
論文（外部サイト）：https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btx555

- **ESMFold**

アミノ酸配列を使用してタンパク質構造を予測。
論文（外部サイト）：https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.ade2574

- **ProteinMPNN**

入力したタンパク質の代替配列を高精度で予測する逆フォールディングモデル。
論文（外部サイト）：https://www.science.org/doi/10.1126/science.add2187

- **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。
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。
論文（外部サイト）：https://arxiv.org/abs/2405.03370

- **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。
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。
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。
論文（外部サイト）： https://doi.org/10.1101/2022.05.25.493516

- **AfCycDesign**

AlphaFold2 のパワーを活用した大環状ペプチドの設計。
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。
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

- **Prodigy**

タンパク質-タンパク質複合体の3次元構造を用いて、その結合親和性と解離定数を予測する計算ツール。
論文（外部サイト）： https://doi.org/10.21769/BioProtoc.2124

- **CodonTransformer**

複数種のコドンを最適化するためのディープラーニングモデルツール。
論文（外部サイト）： https://www.nature.com/articles/s41467-025-58588-7

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

- **ProtNLM**

アミノ酸配列の名前と機能のアノテーションを予測。

- **ESM-2 for PTMs**

配列から潜在的な翻訳後修飾部位を予測。
論文（外部サイト）：https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2023.11.13.566930v1

- **EnzBert E.C. Prediction**

シーケンスから酵素クラスを予測。
論文（外部サイト）：https://academic.oup.com/bioinformatics/article/39/10/btad620/7329097

- **EvoProtGrad Protein Evolution**

変異させる残基を特定。
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。
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。
論文（外部サイト）：https://www.nature.com/articles/s41929-022-00798-z

- **TemStaPro Protein Thermostability Prediction**

40 ℃ から 65 ℃ までのタンパク質の熱安定性を予測。
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。
論文（外部サイト）：https://bmcpharmacoltoxicol.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。
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。
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。
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。
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。
論文（外部サイト）： https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC4999177/

- **Protein Fold Stability Prediction**

タンパク質の安定性を予測。
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。
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。
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。
論文（外部サイト）：https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2023.06.22.544776v1

- **Immune Builder**

配列から抗体、ナノボディ、T 細胞受容体を設計。
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。
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。
論文（外部サイト）：https://github.com/openmm/pdbfixer

- **PDB-mmCIF Converter**

PDB ファイルを CIF / mmCIF ファイルに変換したり、その逆を行う。

- **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。
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。
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マーの生成、最適化、解析のために設計。
論文（外部サイト）： https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/26575315/

- **mmseqs2**

タンパク質配列の高品質な多重配列アライメント（MSA）を生成。
論文（外部サイト）： https://www.nature.com/articles/nbt.3988

- **US-align**

タンパク質、RNA、DNA の 3D 構造をさまざまな構成 (モノマー、オリゴマー、ヘテロ複合体) にわたって比較し、ペアワイズおよびマルチプルアラインメントを行う統合ツール。
論文（外部サイト）： https://www.nature.com/articles/s41592-022-01585-1

- **MUSCLE v5**

タンパク質配列の高品質な多重配列アライメントを迅速に生成。
論文（外部サイト）： https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2021.06.20.449169v2.full.pdf

- **MAFFT**

タンパク質配列の多重配列アライメントを迅速に生成。
論文（外部サイト）： https://academic.oup.com/mbe/article/30/4/772/1073398

- **OmegaFold**

MSAに依存せずに正確なde novoタンパク質構造を予測。
論文（外部サイト）： https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2022.07.21.500999v1

- **FastTree**

大規模な配列アラインメントから近似的に最尤系統樹を推定するためのソフトウェアツール。
論文（外部サイト）： https://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0009490

- **ADMET-AI**

ADMET特性を予測するために設計された機械学習モデル。
論文（外部サイト）： https://academic.oup.com/bioinformatics/article/40/7/btae416/7698030

- **ThermoMPNN**

点突然変異によるタンパク質の安定性の変化を予測するために設計されたディープニューラルネットワーク。
論文（外部サイト）： https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2024.08.20.608844v1

- **RhoDesign**

3D構造データに基づくRNA配列の生成設計のためのディープラーニングプラットフォーム。
論文（外部サイト）： https://www.nature.com/articles/s43588-024-00720-6

- **StrucTFactor**

タンパク質の3D二次構造特性を使用して転写因子を予測します。
論文（外部サイト）： https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2024.03.14.585054v2

- **SaProt**

タンパク質の機能予測を強化するために、配列情報と構造情報のギャップを埋めるように設計された構造認識タンパク質言語モデル。
論文（外部サイト）： https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2023.10.01.560349v5

- **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アントを生成します。
論文（外部サイト）：https://arxiv.org/abs/2206.13517

- **FlowDock**

タンパク質-リガンド構造と結合親和性を予測。
論文（外部サイト）： https://arxiv.org/abs/2412.10966

- **ImaPEp***

エピトープ・パラトープペアの結合確率を予測。
論文（外部サイト）： https://www.mdpi.com/1422-0067/25/10/5434

- **Efficient Evolution***

高機能なタンパク質変異体を効率的かつタスク非依存的に設計するための、タンパク質言語モデルベースのツール。
論文（外部サイト）： https://www.nature.com/articles/s41587-023-01763-2

- **Humatch**

抗体の重鎖と軽鎖を遺伝子特異的にヒト化および分類するためのCNNベースのツール。
論文（外部サイト）： https://www.tandfonline.com/doi/10.1080/19420862.2024.2434121

- **DR-BERT**

タンパク質の本質的に無秩序な領域（IDR）をアノテーションするために設計されたコンパクトなタンパク質言語モデル。
論文（外部サイト）： https://www.cell.com/structure/abstract/S0969-2126%2824%2900136-9

- **ProSST**

配列と構造情報を統合してタンパク質機能の予測を強化するタンパク質言語モデル。
論文（外部サイト）： https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2024.04.15.589672v3

- **ParaSurf**

抗体/ナノボディの分子表面を分析してパラトープ結合部位を予測し、Fab/Fvドメイン全体の抗原結合領域を特定するディープラーニングフレームワーク。
論文（外部サイト）： https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btaf062

- **Kluster***

タンパク質構造を構造的類似性に基づいてクラスタリングして分析します。
論文（外部サイト）：https://doi.org/10.1002/pld3.509

- **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/

2025年6月2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