

記号・数字

3D-Surfer 177

欧文

A・B・C

accelerated MD 法 188
 acyl-coenzyme A synthetase 96
 AF-Cluster 187
 AfDesign 23
 aggregation アプローチ 40
 all- α 30
 all- β 30
 AlphaFold 8
 AlphaFold DB (AlphaFold Protein Structure Database) 11, 18, 27, 32, 65, 82, 168, 210
 AlphaFold Server 25, 72, 103, 113
 AlphaFold-Multimer 11, 23, 32, 94, 100, 169
 AlphaFold1 19
 AlphaFold2 11, 15, 27, 80, 100, 113, 142, 168, 184, 191, 195, 204
 AlphaFold3 12, 24, 27, 32, 66, 98, 101, 113, 168, 184, 195, 204
 AlphaMissense 170, 207
 AlphaProteo 13, 201
 Amber 50, 145, 153
 AmberTools 153
 AMBER力場 111
 Anfinsen のドグマ 185
 Anton 186
 AutoDock Vina 111
 Avogadro 37
 B-factor 40
 Babel 42
 backbone model 39
 ball-and-stick model 39
 BindCraft 195
 binder hallucination 法 23
 BL44XU 70
 BLAST 20, 65, 80, 169, 200
 Blender 37
 BlendMol 37
 BMRBj (Biological Magnetic Resonance Data Bank Japan) 67
 BSMA-Arc (Biological Structure Model Archive) 67
 calotte model 40

CASP 15, 92
 CASP14 11, 17, 100
 CATH 30
 CAVER Analyst 37
 cellVIEW 37
 CHARMM 145
 ChEMBL 115
 ChemNet 202
 Chroma 193
 ClinVar 204
 ColabFold 19, 80, 101, 186, 196
 Computed Structure Models 12
 Coot 37
 CPK model 39
 C_a原子 (α 炭素) 17, 27, 39, 85, 151, 169

D・E・F

DALI 179
 DCA (direct coupling analysis, direct coupling 解析) 20, 189
 de novo デザイン 191
 DiffDock 112, 130
 direct coupling analysis 20
 DUD-E 116
 EF (エンリッチメントファクター) 115
 EGNN 112
 Embed 125
 EMPIAR-PDBj (Electron Microscopy Public Image Archive PDBj) 67
 Enamine REAL 115
 ESM 22
 ESM-1b 206
 ESM2 206
 ESM3 201, 206
 ESMFold 22, 173
 Evoformer 20, 84, 171, 184, 207
 expected position error 95
 Foldseek 171, 210
 FoldToken 201
 force-field parameter 145

G・H・I

GaussView 37
 GCN (グラフ畳み込みネットワーク) 114
 GDT_TS (global distance test-total score) 17
 glue atom 140

GNN (グラフニューラルネットワーク) 130
 Google Colaboratory 20, 80
 GPCR 96
 GPT 22
 graph transformer 112
 grid box 121
 GROMACS 153
 Gタンパク質共役受容体 96
 head-to-tail 型 23
 HelixFold3 25, 113
 HighFold 24
 hydropathy index 23
 I/H構造モデル 66
 iCn3D 37
 IDP (intrinsically disordered protein) 106
 IDR (intrinsically disordered region) 28
 induced fitting 116
 Input Embedder 25
 InVADO 37
 ipTM (Interface pTM) 94, 195

J・K・L

JBj (Japan alliance for Bioscience Information) 62
 Jmol 37
 JSmol 37
 Jupyter Notebook 80
 KarmaDock 112, 130
 LES (リガンド排除表面) 40
 licorice model 39
 LigandMPNN 195
 line model 39
 Lipinski の Rule of 5 115
 LiteMol 37
 LLM (large language models, 大規模言語モデル) 22, 204
 LocalColabFold 81, 103, 194

M・N・O

MDN (混合密度ネットワーク) 130
 MDverse 41
 MD (分子動力学) シミュレーション 12, 37, 96, 111, 142, 172, 184
 Meeko 123
 MegaMol 37
 MGLTools 120
 missing region 29

MLM (masked language modeling)
 22, 205
 MMFF 125
 MMSeq2 171
 MM (分子力学) 130
 ModelArchive 66
 MODELLER 117
 MOLDEN 37
 Molecular Dynamics 142
 MolecularNodes 37
 Molmil 分子ビューア 74
 Molscrip 37
 MolSieve 37
 MolSTAR 37
 motif scaffolding 193
 MSA (Multiple Sequence Alignment,
 多重配列アラインメント)
 20, 81, 101, 171, 184, 196, 207
 MSMS 40
 NGLviewer 37
 NMR (核磁気共鳴) 9, 36, 62
 ODDT 129
 OPC 145
 OpenBabel 136
 OpenGL 41

P・Q・R

PAE (predicted aligned error)
 18, 31, 66, 88, 93, 106, 169, 195
 PAINS 115
 PairFormer 25
 PDB (Protein Data Bank) 9, 19, 29,
 37, 59, 81, 101, 111, 142, 169, 208
 PDB-Dev (PDB-Development)
 66
 PDBImages 37
 PDBQT ファイル 121
 pLDDT (predicted local distance
 difference test) 12, 18, 31, 46, 66,
 88, 93, 106, 169, 195, 207
 PLIP 129
 pLM (タンパク質言語モデル)
 22, 201, 204
 PMV 37
 PoseBusters 113, 134
 PoSSuM 114
 Prolif 129
 PROPKA 116
 ProteinMPNN 195
 pTM (predicted template modeling
 score) 94, 195
 PubChem 115

PyMOL 37, 38
 QED 115
 QuickSES 40
 QuteMol 37
 RDKit 123
 RFDiffusion 193, 200
 RFDiffusion All-Atom 193
 RMSD (root mean square deviation)
 11, 151
 RMSF (root mean square
 fluctuation) 152
 Rosetta 19, 192
 RoseTTAFold 113
 RoseTTAFold All-Atom (RFAA)
 12, 24, 113, 193

S・T・U

SaProt 201
 SAS (溶媒接触表面) 40
 sausage view 40
 SCOP 30
 Sequence-Navigator 76
 SES (溶媒排除表面) 40
 SH2 ドメイン 29
 shallow MSA 186
 SMILES 24, 73, 115
 Solubility-AfDesign 23
 SolubleMPNN 195
 space-filling model
 (空間充填モデル) 40
 SPC/E 145
 spike タンパク質 9
 Spring-8 70
 SSAO 37
 stick model 39
 Structure Module 20, 84
 Structure similarity cluster 171
 Swiss-Prot 65, 174
 Tequatrovirus T4 リゾチーム 9
 TIP3P 145
 trace model 39
 Transformer 20, 112, 205
 UCSF Chimera 37, 163
 UCSF ChimeraX 37
 Umol 24
 Uni-Dock 130
 UniProt 12, 20, 65, 82, 168
 Unity3D 37

V・W・X

variant effect prediction 204

velocity Verlet 法 143
 VESTA 37
 VIAMD 37
 VMD 37, 38
 Volmap tool 40
 VS (バーチャルスクリーニング)
 114
 WHAT IF 37
 Winmostar 37
 worldwide PDB 60
 WuXi AppTec GalaXi 115
 wwPDB 60
 XRDa (Xtal Raw Data Archive)
 67
 X 線小角散乱法 66
 X 線結晶構造解析 9, 29, 36, 63, 168

Y・Z

YASARA 37, 38
 zero-shot 予測 206
 ZINC 115
 Znumber 126

和文

あ行

浅い (shallow) MSA 186
 アボ体 116
 アミノ酸 20, 27, 73, 83, 102, 116,
 170, 184, 192, 204
 アミノ基 27, 153
 α -ヘリックス 15, 28, 69, 185, 197
 α/β 30
 $\alpha + \beta$ 30
 α 炭素 (C_α 原子)
 17, 27, 39, 85, 151, 169
 アロステリックサイト 25, 135
 アンサンブル・ドッキング 116
 一次構造 28
 遺伝的アルゴリズム 110
 液-液相分離 29
 塩橋 29, 51
 エンリッチメントファクター (EF)
 115
 重みパラメーター 101
 温度因子 40

か行

カートゥーンモデル	39
カウンターイオン除去	115
化学架橋法	66
拡散モデル	25, 112
核磁気共鳴 (NMR)	9, 36, 62
化合物ID	78, 115
化合物の結合による構造変化	116
カットオフ法	149
カルボキシル基	27
環構造	110
環状型のペプチド構造	23
キナーゼドメイン	29
空間群	63
空間充填モデル (space-filling model)	40
クライオ電子顕微鏡 (クライオEM)	9, 29, 63, 108
クラス	30
グラフ畳み込みネットワーク (GCN)	114
グラフニューラルネットワーク (GNN)	130
クラミドモナス	11
結合親和性予測値	109
格子定数	63
酵素	31
構造アンサンブル	116
構造因子	70
構造サンプリング	85, 96, 186
構造ドメイン	29, 93, 106
構造分類データベース	30
酵素の触媒部位	29
骨格モデル	39
混合密度ネットワーク (MDN)	130
コンタクトマップ	52
コンタクト予測	15

さ行

三次構造	28
ジスルフィド結合	23, 189
シトクロムc	30
シニョリン	9
主鎖	27, 37, 39, 66, 84, 109, 178, 191
ジンクフィンガー	29
水素原子	17, 27, 134, 145, 169
スコア関数	110
スナップショット	151
生成モデル	112
世界規模のPDB	60
ソーセージ表示	40

側鎖	12, 23, 27, 48, 109, 191
速度ベルレ (velocity Verlet) 法	143
疎水性コア	29

た行

大規模言語モデル (LLM)	22, 204
多重配列アラインメント (MSA)	20, 81, 101, 171, 184, 196, 207
単位格子	63
タンパク質言語モデル (pLM)	22, 201, 204
蛋白質構造データバンク (PDB)	9, 19, 29, 37, 59, 81, 101, 111, 142, 169, 208
タンパク質デザイン AI	191
低温電子顕微鏡	36, 63
デコイ化合物群	115
天然変性タンパク質	106
天然0変性領域	28
天然変性0領域予測	15
テンプレート	20, 84, 100, 196, 207
統合/ハイブリッド (I/H) 構造モデル	66
ドッキング計算	12, 23, 108
トラジェクトリー	13, 40, 50, 151
トランスポーター	96, 184

な行

二次構造	15, 28, 39, 70, 200
二次構造予測	15

は行

バーチャルスクリーニング (VS)	110, 114
バイキュービック補間	145
パッキング	29
比較モデリング	117
微視的状態	145
ビペラジン環	117
非芳香環	111, 117
ファンデルワールス相互作用	144
ファンデルワールス半径	40
フォールド	30, 175, 187, 195
複合体予測	82, 100, 196
ブラインド・ドッキング	109
フリードッキング手法	100
プロトン化状態割り当て	115
分解能	63

分子動力学 (MD) シミュレーション	12, 37, 96, 111, 142, 172, 184
分子ドッキング計算	108
分子表面モデル	39
分子力学 (MM)	130
β -シート	28
β -ストランド	28
ヘテロオリゴマー	100
ヘテロ複合体	100
変異導入効果予測	13, 204
ボーズ	109, 152
ポケット探索	114
ホットスポット	29
ホモ複合体 (ホモオリゴマー)	100
ホモロジーモデリング法	20
ポリペプチド鎖	27, 83, 101

ま行

膜タンパク質	31, 96
マクロサイクル	110
マルチドメインタンパク質	94
ミオグロビン	30
ミスセンス変異	204
メタゲノム配列	20
免疫グロブリン	30
モチーフ	29

や行

焼きなまし法	110
溶媒効果	111
溶媒接触表面 (SAS)	40
溶媒排除表面 (SES)	40
四次構造	28
予測信頼 (確信) 度	12, 18, 31, 66, 91, 142, 169, 195, 207

ら行

ラマチャンドランマップ	37, 51
ラリアット型	23
リガンド排除表面 (LES)	40
リガンド・フレキシブル・ドッキング	110
力場パラメーター	145
リゾチーム	30
立体構造類似性検索	13
リデザイン	191
リボスクレーパー	30
類縁構造	88
ループ領域	28