

Life Science Product Guide

Target Validation, Hit Identification,
Lead Discovery 및 Optimization을 가속화하는
통합 소프트웨어 플랫폼



Schrödinger



■ Hit Identification

- **Hit Discovery**
 - 구조 기반 가상 스크리닝
 - 리간드 기반 가상 스크리닝
- 리간드 준비

■ Lead Optimization

- Affinity 예측
- Hit-to-lead 및 라이브러리 디자인
- 특성 예측

■ Target Validation and Structure Enablement

- **Structure Enablement**
 - Homology Modeling
 - Experimental Structure Refinement
 - 바인딩 포즈 검증
- 결합 부위 및 구조 분석 수행

제품 가이드

Hit Identification

화학적으로 다양한 고품질 초기 스크리닝 히트를
식별하고 화합물 라이브러리를 수백에서
수십억까지 확장합니다.

Hit Discovery를 위한 다양한 워크플로우

신속한 가상 스크리닝 기술을 활용하여 화합물 라이브러리 중 가능성 높은 후보 물질을 정확하게 스크리닝합니다.

구조 기반 가상 스크리닝

새로운 리간드 Docking

3차원 수용체 구조와 결합 예상 부위를 바탕으로 후보 화합물의 결합형태와 결합력 예측 오랜 시간동안 시장에서 충분히 검증된 docking 알고리즘을 기반으로 사용하기 쉬운 모델링 지원

> Product : [Glide](#)

Docking 및 머신 러닝을 통한 Billion+ Library 가상 스크리닝

Glide docking과 머신 러닝이 결합된 자동화 워크플로우를 통해 수십억 개의 화합물 및 아이디어를 보다 효율적으로 스크리닝

> Product : [Active Learning Glide](#), [Virtual Screening Web Service](#)

리간드 기반 가상 스크리닝

Pharmacophore를 사용한 스크리닝

생물학적 활성이 알려진 분자의 입체적/전자적 특성을 기반으로 화합물을 신속하게 스크리닝, 수용체 또는 복합체 기반 pharmacophore 생성 지원

> Product : [Phase](#)

3D Ligand Shape을 사용한 스크리닝

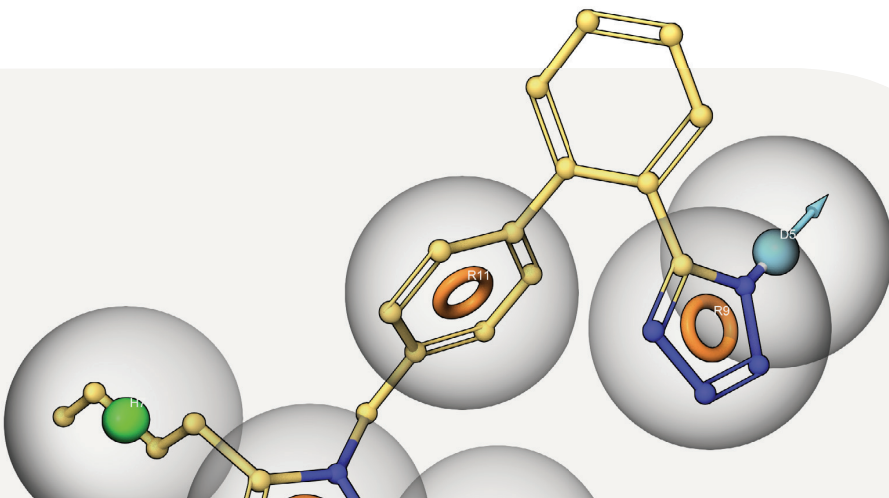
활성이 알려진 리간드 구조의 3D shape 및 pharmacophore를 기반으로 다양한 화합물을 빠르게 스크리닝

> Product : [Shape Screening \(GPU\)](#)

Enrich Hits from Screens

Advanced sampling 및 scoring 방법을 사용하여 가상 스크리닝의 품질 개선

> Product : [FEP+](#), [WScore](#)



정확한 리간드 준비

정확한 이온화 및 tautomeric 상태의 bioactive 리간드 구조를 신속하게 생성하여 관련 히트를 식별할 확률을 높입니다.

리간드 준비

분자 구조를 1D, 2D에서 3D로 쉽게 변환하는 동시에 구조 및 화학적 enumeration 수행

> Product: [LigPrep](#)

준비된 화합물 라이브러리를 이용한 스크리닝

Enamine, MolPort, Sigma Aldrich, WuXi 및 Mcule에서 준비된 1000만~10억 개의 화합물 라이브러리*를 활용해 신속한 가상 스크리닝 착수 가능

*별도 구매를 통해 화합물 라이브러리 사용가능

Knowledge-based pKa 예측

강력한 알고리즘을 사용한 pKa 예측
경험적 방법(Epik-Classic) 및 머신러닝(Beta) 기반 알고리즘 제공

> Product: [Epik](#)

QM-based pKa 예측

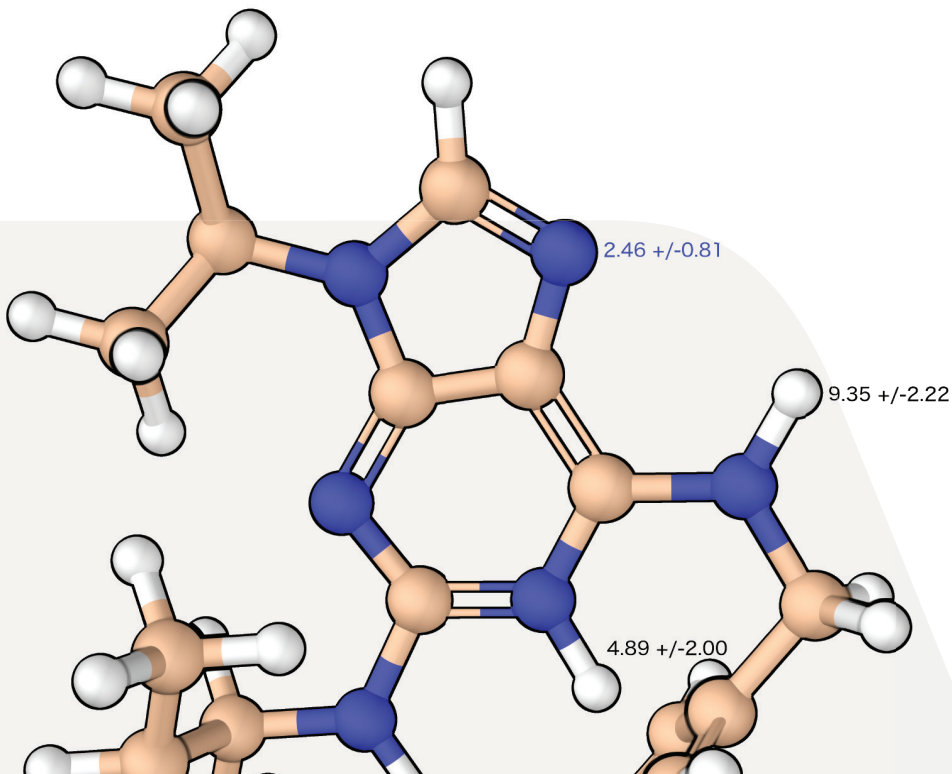
정확도 높은 양자역학 접근 방식을 사용하여 분자의 pKa를 예측합니다

> Product: [Jaguar](#)

Conformation Analysis을 위한 앙상블 생성

보다 정확한 리간드의 생리 활성 형태를 예측하기 위한 chemical space 탐색 수행

> Product: [ConfGen](#), [MacroModel](#)



제품 가이드

Lead Optimization

강력한 예측 모델링으로 다양한 특성을
빠르고 정확하게 평가하여
최적의 신약 후보물질을 디자인 합니다.



Schrödinger

정확하고 신뢰할 수 있는 Affinity 예측

Binding Affinity 예측

실험 방법과 유사한 정확도로 새로 설계된 분자의 결합력을 예측하여 개발 후보로 적합한 화합물 선별

> Product: [FEP+](#), [OPLS4](#)

Hit-to-lead 및 Lead Optimization 라이브러리 디자인

Hit-to-lead 및 lead optimization 라이브러리를 빠르게 enumeration 하여 초기 Hit의 특성을 개선하고 lead-like 분자로 디자인 합니다.

광범위한 Chemical Space 탐색 / Enumeration을 통한 Chemical Space 확장

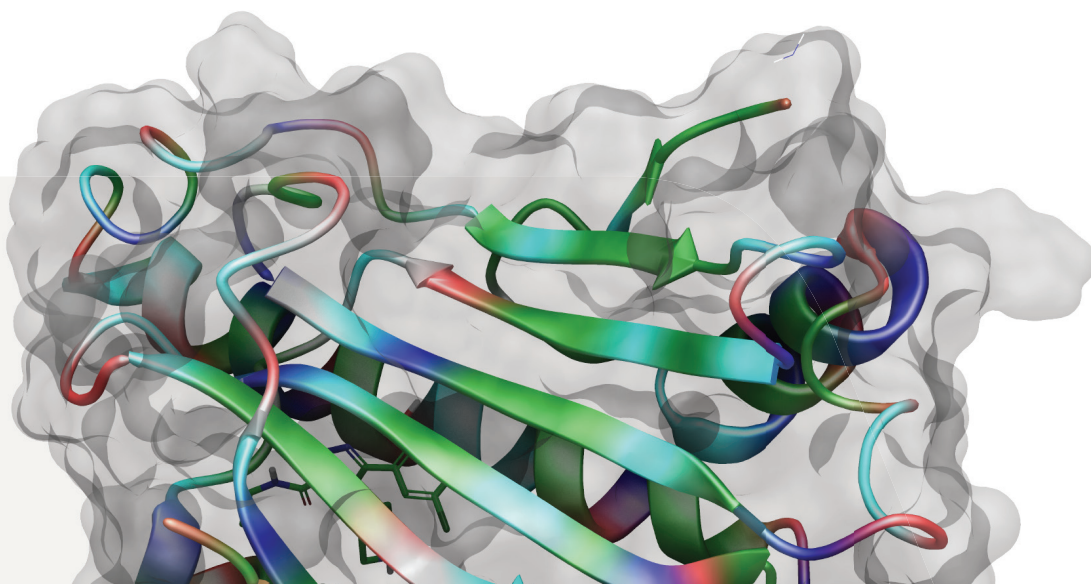
다양한 enumeration 기술을 활용하여 확장된 chemical space의 후보 생성

> Product: [Core Hopping](#), [R-Group Enumeration](#), [PathFinder](#), [Hit Expansion](#), [Bioisostere Replacement](#)

쉽고 간단한 라이브러리 디자인

공통의 디자인 목표를 충족시키기 위해 빠르고 간편하게 신규 물질 아이디어를 생성하는 직관적인 워크플로우 제공
2D/3D 화학구조 정보 활용 설계

> Product: [Ligand Designer](#), [LiveDesign](#)



정확한 특성 예측

시뮬레이션과 머신러닝 기법을 통해 새롭게 디자인된 분자의 특성을 예측하고 평가하여 분자의 우선 순위를 빠르고 효율적으로 결정하도록 돕습니다.

데이터 기반 Compound Progression을 위한 MPO를 신속하게 구축

사용자 정의가 가능하고 동적인 Multiple Parameter Optimization(MPO)를 구성하여 신약개발 과정의 물질 우선순위 결정 지원

> Product: [LiveDesign](#)

Affinity, Selectivity 및 Solubility 예측

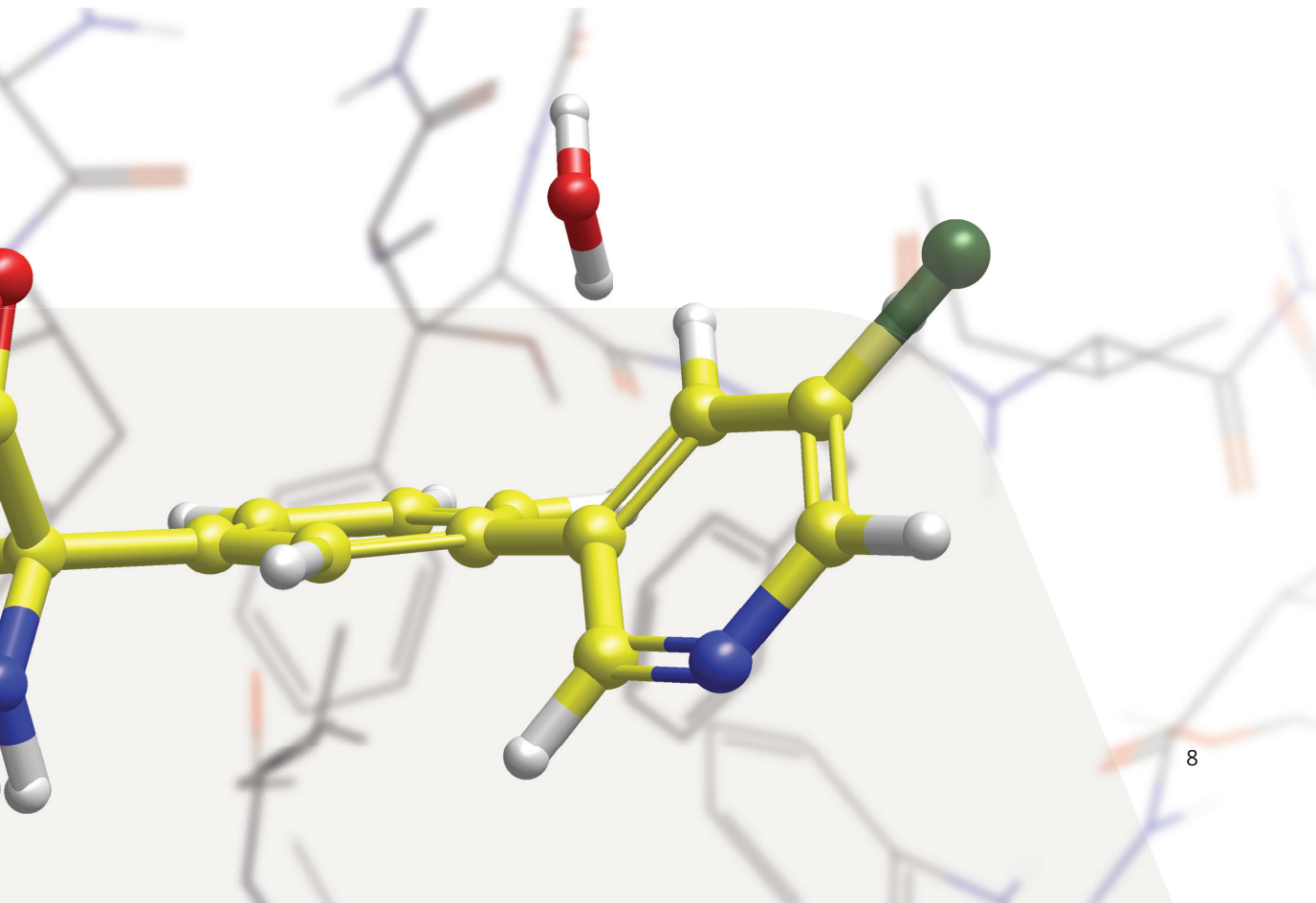
Lead의 drug-like 특성을 개선하는 free energy perturbation 기능을 사용하여 리간드의 affinity, selectivity 및 solubility를 정교하게 예측

> Product: [FEP+](#)

전문가 수준의 QSAR 및 QSPR 모델 생성 및 적용

딥러닝을 포함한 다양한 데이터 모델링 기술을 사용하는 QSAR 및 QSPR 예측 모델을 자동으로 생성 및 적용 가능

> Product: [AutoQSAR](#), [DeepAutoQSAR](#)



막 투과성 예측

정확한 물리학 기반 접근 방식으로
passive membrane permeability 예측

> Product: [Membrane Permeability](#)

Reactive Chemistry에 대한 통찰력 확보

QM/MM 접근 방식을 활용하여 covalent inhibitor의
reactive와 transition state의 interaction 시뮬레이션

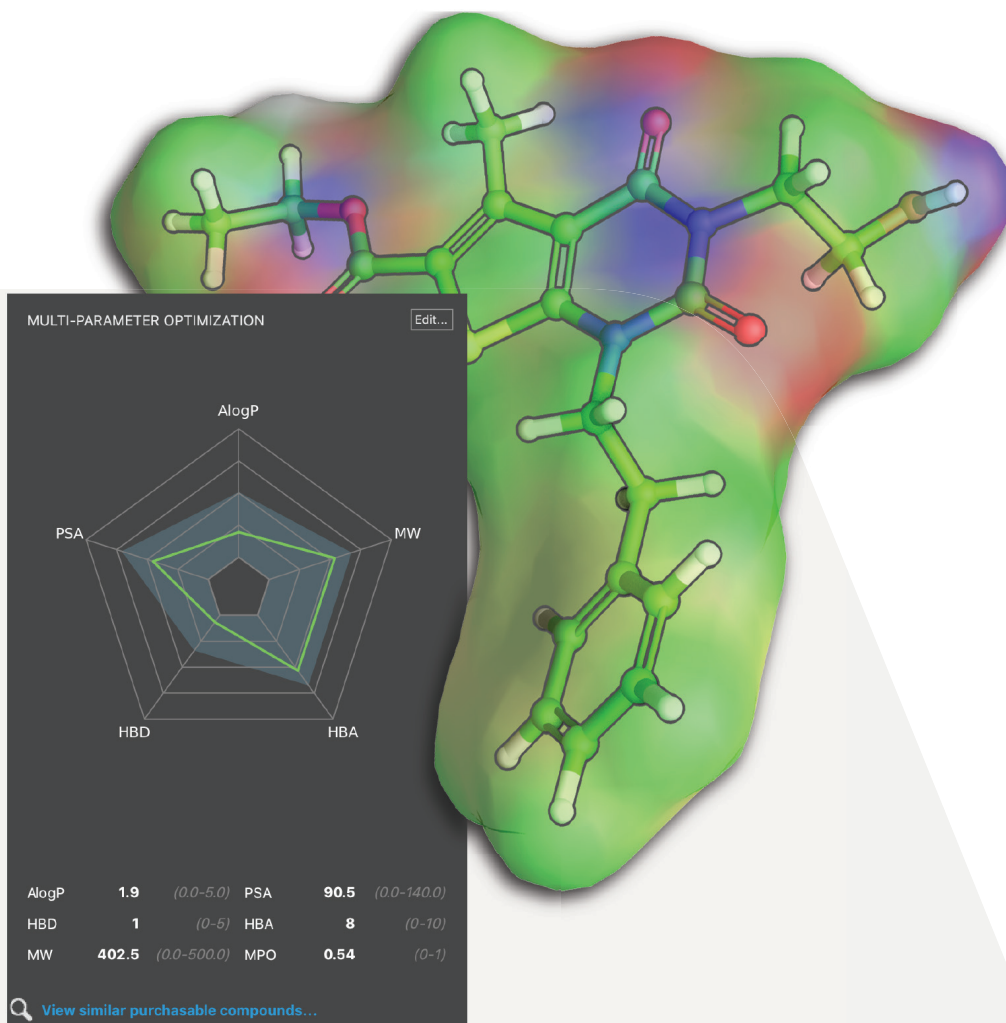
> Product: [QSite](#)

ADME 예측

리간드의 ADME 특성 예측

- * CNS Activity
- * HumanOralAbsorption
- * HERG K+ channel blockage
- * Brain/Blood Partition coefficient
- * MDCK cell permeability (nm/s)
- * Binding to HSA
- * Maximum transdermal transport rate

> Product: [QikProp](#)



제품 가이드

Target Validation and Structure Enablement

단백질 표적 평가를 수행하고
이후 단계에서 활용될 정교한 타겟 구조를 구축하여
신약후보 설계과정의 오차를 감소시킵니다.



Schrödinger

Structure Enablement

단백질 complex를 예측하고 개선하여 구조 기반의 drug design을 가능하게 합니다.
고성능 컴퓨터 시뮬레이션을 통해 새로운 drug-like molecule의 발견을
가능하게 함으로써 구조적 통찰력을 얻을 수 있습니다.

Homology Modeling

구조 기반 디자인을 위한 Homology Modeling

유전적 상동성 정보를 활용하여 약학적으로 관련된 표적의 homology model을 생성

> Product: **Prime**

Experimental Structure Refinement

신뢰할 수 있는 모델을 생성하기 위한 구조 수정 및 평가

간단한 도구를 통해 일반적인 구조적 문제를 수정하고
신뢰할 수 있는 all-atom protein model 생성하여
후속 계산의 정확도 향상

> Product: **Protein Preparation Wizard**

단백질 결정 구조 수정

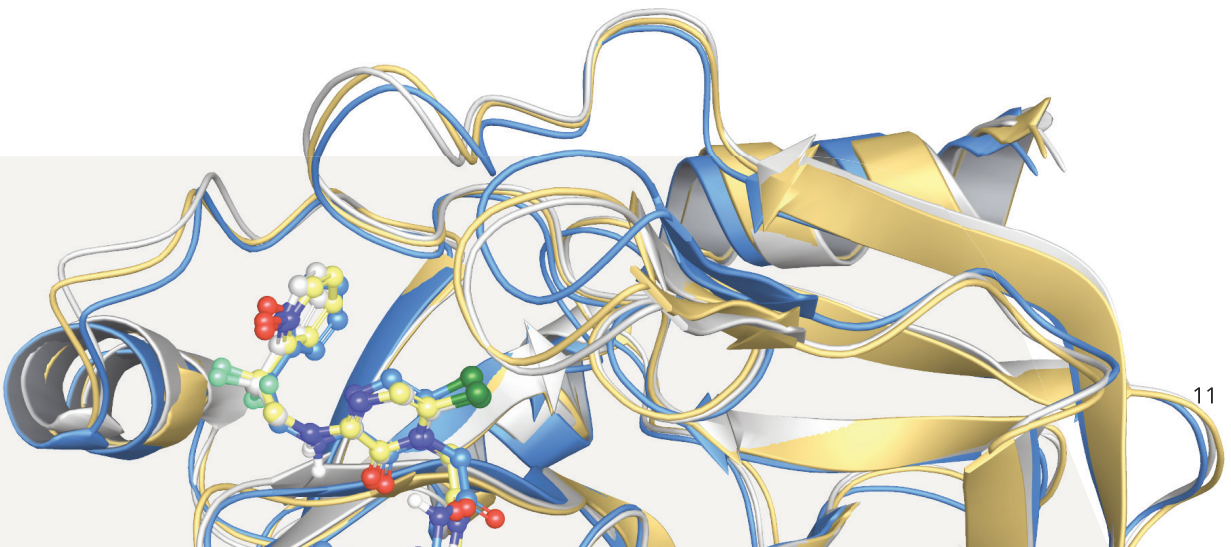
Structure-based drug discovery를 위해 X-ray 결정
구조를 보다 정확하게 분석하고 수정 가능

> Product: **PrimeX**

Cryo-EM 구조에서 리간드 포즈 개선

cryoEM 전위 맵에 Glide를 적용하여
단백질-리간드 복합 구조 개선 가능

> Product: **Glide**

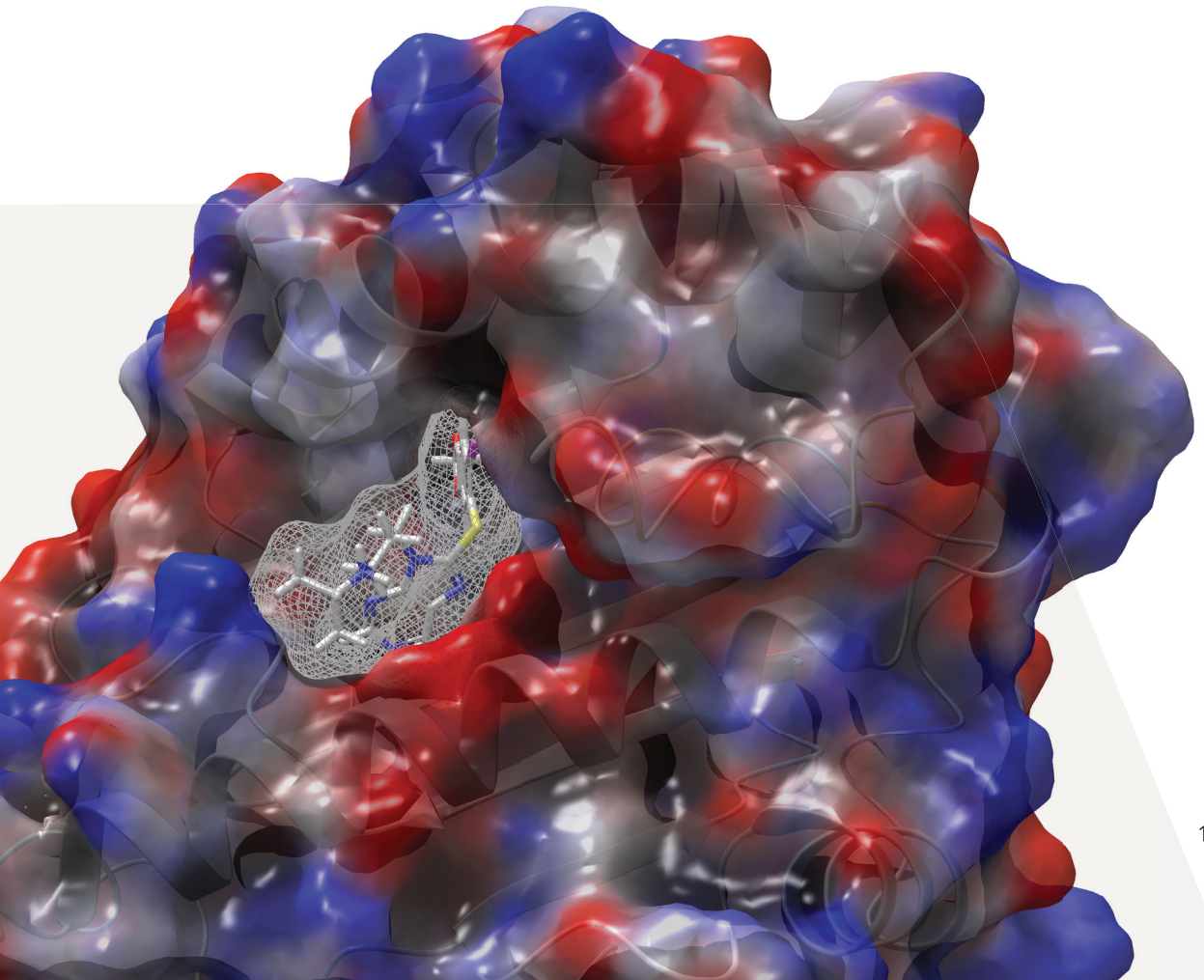


향상된 물리기법 기반 바인딩 포즈 검증

새로운 단백질-리간드 complex 예측 및 Homology Model 개선

높은 정확도의 induced-fit docking 워크플로를 사용하여 약물과 단백질의 side-chain의 유동관계를 분석
자유에너지섭동 기법을 통해 구조적으로 최적화된 단백질-리간드 복합체의 구조 및 결합력 예측

> Product: **IFD-MD, FEP+**



결합 부위 및 구조 분석 수행

Binding site에 대한 druggability를 탐색하고 잠재적인 상호작용을 분석하여 리간드 최적화를 위한 새로운 아이디어를 제시합니다.

Binding Pocket 식별

수용체의 특성을 탐색하여 가용한 binding site 탐색 및 평가

> Product : [SiteMap](#)

분자 거동 연구탐색

고성능 분자 역학 엔진으로 동적인 현상을 분석하고 molecular motion을 연구

> Product : [Desmond](#)

Hydration Site 분석

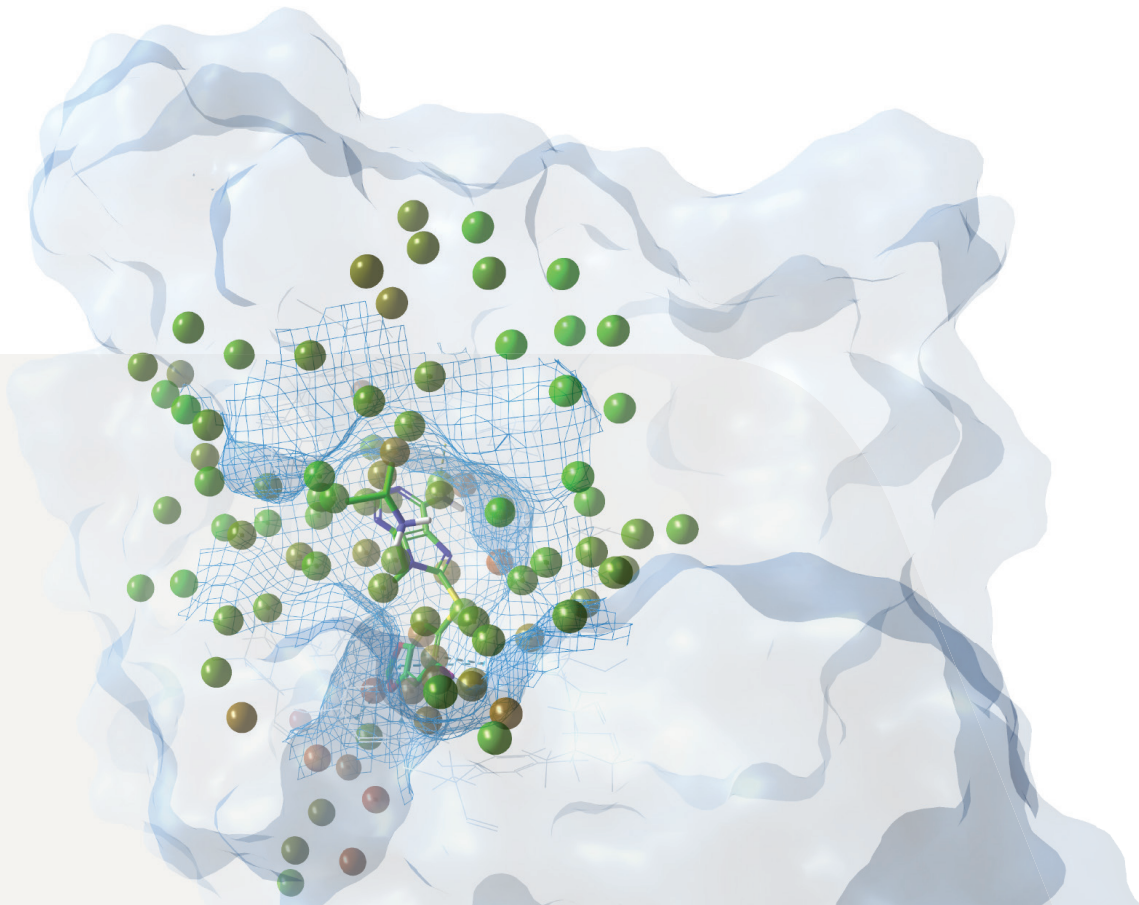
결합 부위에서의 hydration 위치와 열역학적 potential을 예측하여 리간드 최적화의 새로운 가능성 탐색

> Product : [WaterMap](#)

Cryptic Binding Site

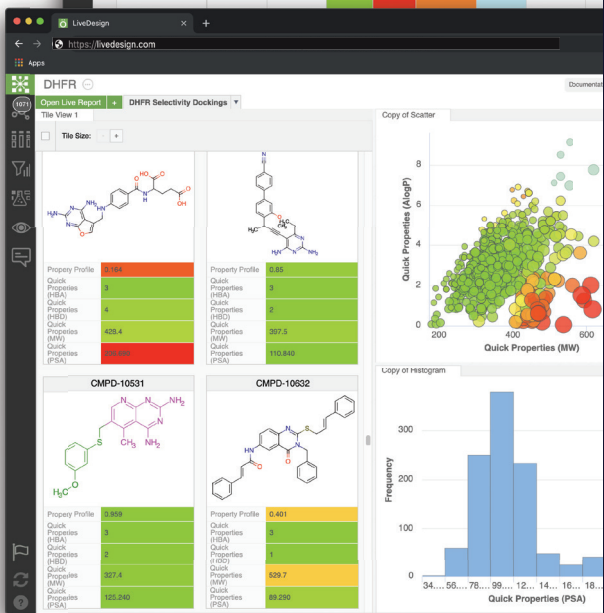
혼합 용매 시뮬레이션을 위한 metadynamics accelerated sampling 워크플로우를 사용하여 cryptic binding pocket을 설명하고 binding hot spot을 시각화

> Product : [Desmond](#)





신약개발연구를 가속화하는 클라우드 기반
엔터프라이즈 인포메틱스 솔루션



더 나은 후보물질을, 더 빨리

- 아이디어가 떠올랐을 때, 즉시 분석하고 테스트 해보세요. 협업을 위해 고안된 플랫폼을 통해 신약 탐색연구의 타임라인을 가속화 합니다.
- 각 조직에 특화된 커스터마이징으로 연구의 성공 가능성을 높이세요. 정교한 화학정보학과 강력한 데이터분석 기능이 함께 합니다.
- 머신러닝을 바탕으로 특성을 예측하고, 신약 설계의 보조수단으로 활용해 보세요.

모두를 위한 전문 분자모델링

- 슈뢰딩거 분자모델링 솔루션과 3rd Party 소프트웨어를 통합하여 전반적인 약물설계과정의 구조-활성 상관관계 분석을 더욱 빠르게 합니다.
- 다양한 API 연동을 통해 프로젝트의 다른 데이터들과 컴퓨터 모델링 결과를 나란히 보고 협업할 수 있습니다.
- 약물 설계과정을 가속화 하기 위해 새로운 약물에 대한 아이디어를 LiveDesign 에 추가하는 순간 사용자가 보유한 컬럼 모델을 바탕으로 사전 정의된 분자모델링 시뮬레이션 프로토콜 및 머신러닝 예측이 이뤄집니다.

조직 전체의 협업 강화

- 라이브, 클라우드 기반, 단일 플랫폼을 바탕으로 조직 구성원 간의 시간과 장소의 한계를 초월한 협업을 지원합니다.
- 매 순간 발생하는 업데이트 사항은 라이브 업데이트가 이뤄지며, 필요한 경우 알림을 받을 수 있습니다.
- 다양한 부가정보로부터 Hypothesis 와 SAR 정보를 얻을수 있도록 지원합니다.



아이디어 생성

쉽게 쿼리할 수 있는 데이터로 분석 및 시각화하여 협업할 수 있습니다. 강력한 화학정보학 및 자동화된 모델링 시뮬레이션으로 새로운 아이디어를 즉시 테스트합니다.

전문 모델링

Maestro 또는 가용한 다른 분자모델링 엔진을 데이터를 푸시 및 풀링하는 풍부한 API로 쉽게 통합하여 전문가 모델링의 프로토콜과 결과를 배포합니다.

물질 합성 추적관리

화학물이 다음 단계로 이동할 때 제공되는 시스템 알림으로 플랫폼 내에서 합성 및 분석 데이터의 상태와 정보를 쉽게 추적할 수 있습니다.

Assay 정보 추적관리

다양한 조직간에 발생하는 다양한 형태의 Assay 결과를 통합하여 확인하고 업데이트되는 정보에 대한 알림을 받을 수 있습니다.

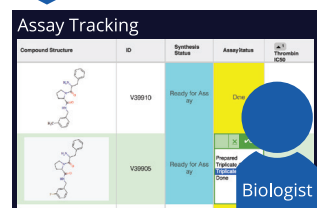
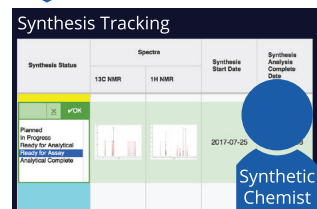
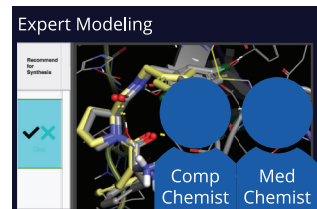
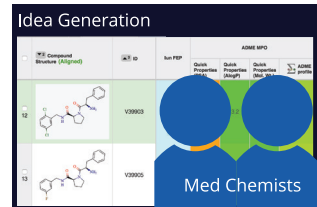
리뷰

프로젝트 중점 데이터와 함께 진행 중인 신규 약물 아이디어들과 프로젝트 진행 상황을 전반적으로 리뷰합니다. 원활한 SAR 검증을 위해 커스터마이징 가능한 대시보드 뷰에서 새로운 Assay 결과를 시뮬레이션 결과와 함께 비교해볼 수 있습니다.

반복

특성 개선 및 다양한 분석을 위한 화학물을 선택하고 쉬운 화학물 진행 도구를 사용하여 반복을 통해 Design-Make-Test-Analyze 사이클을 진행합니다.

신규 아이디어에 대한 자동화된 시뮬레이션 예측으로 DMTA (Design-Make-Test-Analyze) 사이클을 반복하여 물질 개선 및 추가 분석을 위한 물질 선별을 원활히 할 수 있습니다.



과학 및 기술 지원



기초과정과 전문과정의 사용자를 위해 설계된 교육자료

전문가 육성을 위한 방대한 교육 자료 및 교육 과정



과학적인 부분과 기술적인 부분을 아우르는 전문가의 지원 포함

업계 최고의 과학 및 기술 지원을 위한 다양한 형태의
고객지원 제공



다양한 컴퓨터 환경 지원

Linux, Windows, Mac 및 클라우드 기반 솔루션 플랫폼 지원

Contact us: info-korea@schrodinger.com

Learn more: schrodinger.com



Schrödinger

Copyright © 2022 Schrödinger, Inc.