

(주)신테카바이오, AI 신약개발 플랫폼 화합물 유도체 자동 생성방법 특허 취득**▶ 화합물의 최적 결합 형태의 도출 가능성 향상 효과****▶ AI 신약개발 플랫폼 구축에 대한 특허 취득으로 기업가치 제고**

인공지능(AI) 신약개발 전문기업 신테카바이오(226330, 대표이사 정종선)가 [인공지능 신약 플랫폼 구축을 위한 표적 단백질에 대한 화합물 유도체 생성방법] 에 대한 특허를 등록 완료했다고 밝혔다.

신테카바이오가 금번 취득한 특허는 신약 개발을 위한 CADD(Computer aided drug discovery) 또는 인공지능 신약 플랫폼의 구축을 위해 신약 유효물질 발굴 과정에 적용되는 컴퓨터 상 선행-스크리닝(in silico Prescreening) 등에 활용될 수 있는 기술로, 특정 표적 단백질에 대하여 기존 유효 화합물로부터 다양한 형태의 유도체를 생성하는 방법, 해당 방법에 의해 생성된 컴퓨터 상(in silico) 유도체 및 유도체를 생성하는 방법에 의해 구축된 인공지능 신약 플랫폼에 관한 것이다.

본 특허의 강점은 주어진 타겟의 포켓안에서 스케폴드 (scaffold)가 자동으로 자라나는 기능 (Auto grow function) 이다. 이러한 기능은 단백질 포켓에 알려진 물질이 전혀 없는 상태에서도 인공적인 가상물질을 생성하는 목적으로도 활용이 된다. 따라서, 언어모델기반 100억단위 화합물의 가상탐색을 위한 초기 템플릿 자동생성에도 활용이 된다. 포켓에서 자동으로 물질조각이 자라나는 기능은 일부 글로벌 제약사만 가지고 있을 정도로 신약개발에 있어 핵심 첨단 기술이다.

또한, 본 특허는 유도체 생성 방법을 통하여, 표적 단백질에 실제 결합 가능성이 향상된 유도체를 생성하거나, 유효 화합물에 비해 표적 단백질과의 결합 친화도가 개선되거나, 표적 단백질의 활성에 미치는 영향이 개선된 유도체 생성이 가능하다. 또 유도체를 생성하는 과정에서 타겟 공간 내의 결합 가능한 화합물의 결합 형태(pose)가 함께 도출되므로, 인공지능 신약 플랫폼에서 분자동역학적 시뮬레이션이 수행되는 경우, 최적 결합 형태의 도출 가능성을 향상시키는 효과를 기대할 수 있다.

정종선 신테카바이오 대표는 “금번에 취득한 특허는 당사의 AI 신약개발 플랫폼의 가장 핵심적인 기술로, 막대한 양의 데이터를 대상으로 단시간내 화합물 스크리닝 통한 최적의 후보물질 탐색을 가능하게 하는 혁신적인 기술이다. 향후 꾸준히 연구기술에 투자하여 지적재산권 확보를 통해 기업가치를 제고해 나가겠다”고 밝혔다.

신테카바이오는 최근 동 기술 특허 외 미국에서 ‘SYNTEKABIO LAUNCHPAD’와 ‘STB LAUNCHPAD’ 상표권을 취득하며 미국에서도 사업에 박차를 가하고 있다.



<신테카바이오 특허증>