



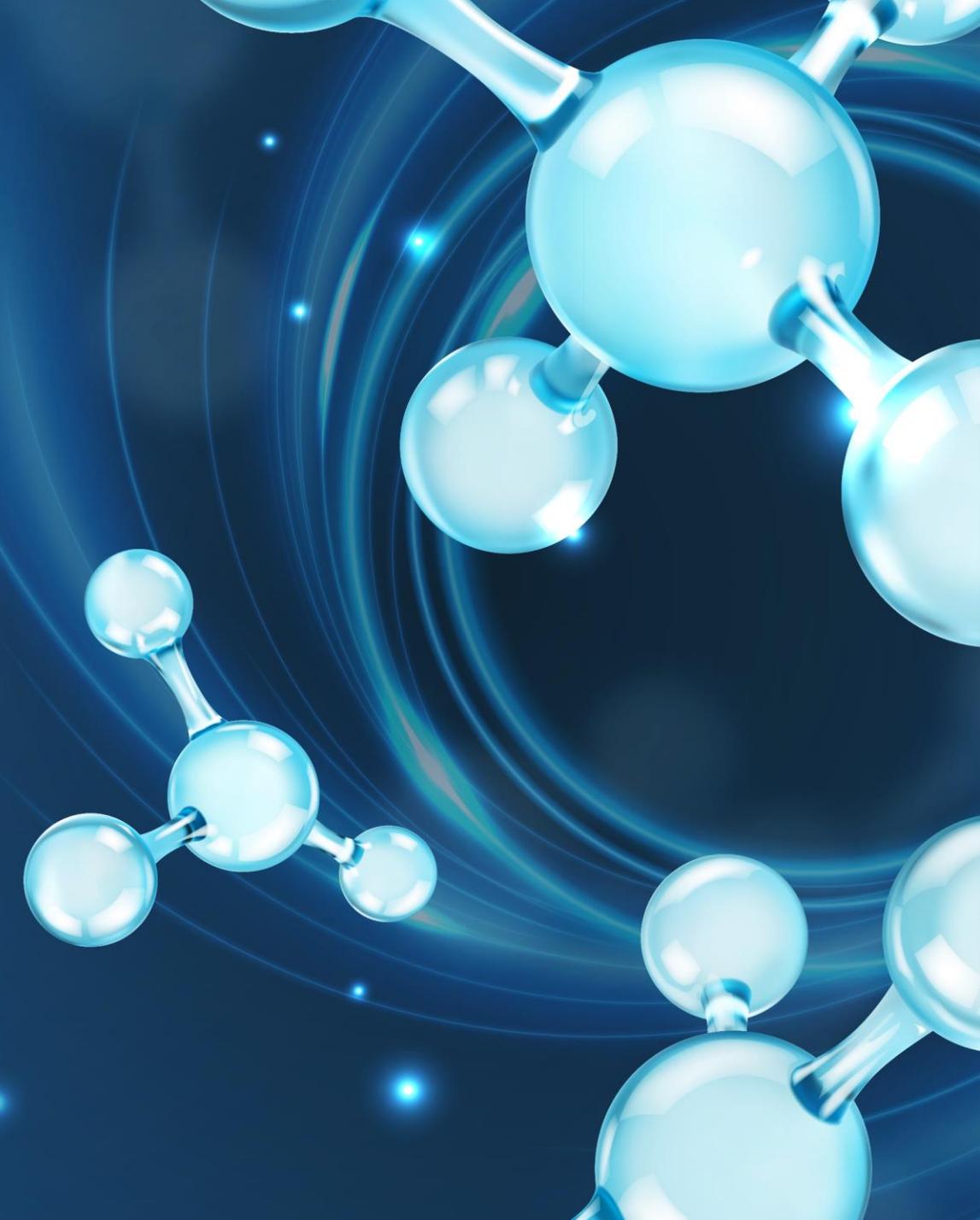
Bioinformatics & Molecular Design Research Center

분자설계연구소 사용설명서

Science goes beyond Technology to ART



2023.12.



분자설계연구소 (Bioinformatics & Molecular Design Research Center)

AI 기반의 신약설계, 천연물 소재개발, 바이오 DB 구축 및 활용,
그리고 양자컴퓨팅을 통한 혁신적인 신약 및 소재를 개발하여 인류의 건강과 풍요로운 삶을 추구하는 민간연구소

지금까지, 분자설계연구소는

2002년 설립되어 바이오 신약 관련 교육을 진행하여 수많은 전문가를 양성하였고,
글로벌 심포지엄을 개최하여 세계적인 과학의 교류의 장을 마련해 왔습니다.

현재의, 분자설계연구소는

AI 기반의 신약개발 및 천연물 소재 분석용 다양한 플랫폼을 개발하여 바이오 데이터베이스를 구축하고 이를 활용하고 있고
양자컴퓨팅을 통한 친환경 소재 설계 기술 개발 등 과학적 탐구와 혁신적인 기술의 교차점에 위치해 있습니다.

앞으로, 분자설계연구소는

신약과 소재의 발견 및 개발 과정을 혁신적으로 변화시키고, 인류의 건강과 복지 향상에 기여하고자 합니다.
이를 통해 의학, 화학, 생명과학 분야에서의 새로운 발전을 추구합니다.

대표성과



01 수행과제

- 과기부 92개
- 산업부 42개
- 민간기업 70여개
- 그 외 환경부, 중기부, 보건부 등 60여개
- 388억원 이상의 과제 수행

* 과제개수는 다년도과제 연차별 합산
* 과제비는 정부출연금 기준



02 특허권

- 국내특허 21개 보유
- 해외특허 11개 보유
- 특허권 양도 기술사업화 라이선스아웃 3건
- 상표권 등록 추진 중



03 연구네트워크

- 정부출연연구기관
한국화학연구원 (KRICT)
한국화학융합시험연구원 (KTR)
한국식품연구원 (KFRI) 등
- 대학
연세대학교, 서울대학교, 경희대학교
송실대학교, 서울시립대학교 등
- 기업
아모레퍼시픽, (주)파로스아이바이오
삼진제약(주), (주)쓰리빌리온, (주)캠에센
(주)캠토피아, (주)굳티셀 등



04 스핀오프 회사

- (주)바오밥에이바이오 2018년 설립



- (주)벤틱바이오 2020년 설립





Service

01. AI 기반 신약설계서비스 (AVENGERS, CARPET)
02. AI 기반 천연물 원스톱 플랫폼 (FloraGenesis)
03. 바이오 DB 구축 서비스
04. 독성정보 예측 및 활용 서비스

R&D

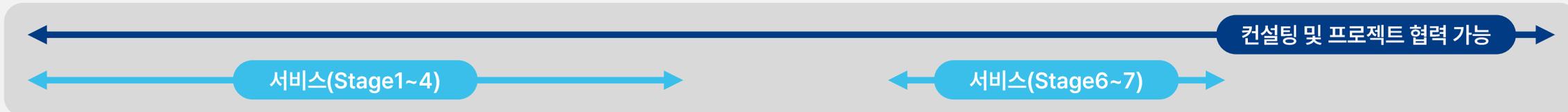
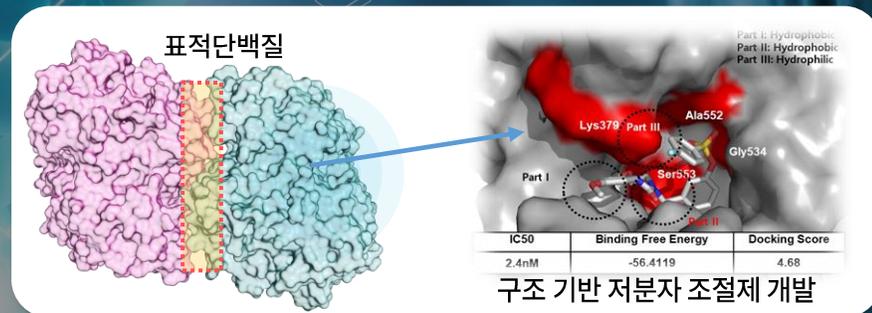
01. 양자컴퓨팅 활용 연구개발



AVENGERS 2.0

저분자 표적 치료제 개발을 위한 신약 설계 플랫폼

AVENGERS (Advanced Virtual Engines and General Energy-based Ranking Systems)



CARPET 2.0

단백질 치료제 및 효소 개발을 위한 신규 단백질 설계 및 디자인 서비스
 CARPET(Computer-Aided Rational Protein Engineering Toolbox)

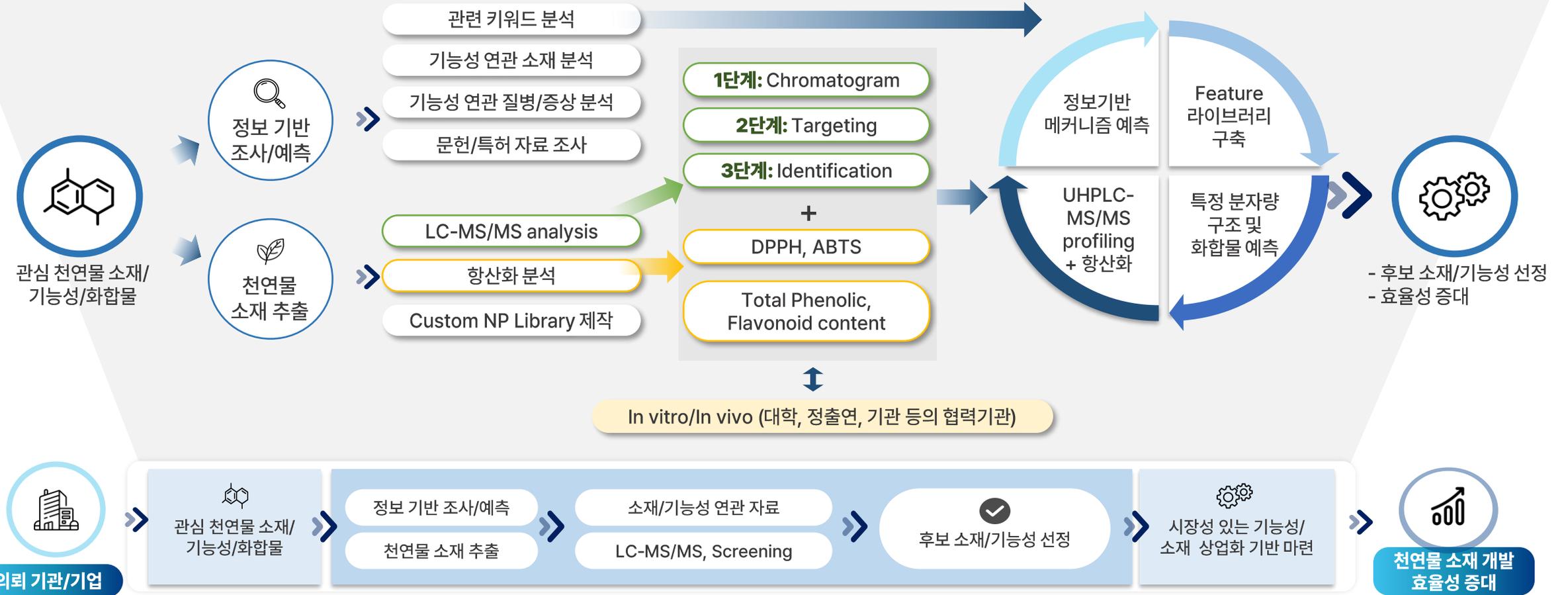


Stage 1	Stage 2	Stage 3	Stage 4	Stage 5	Stage 6	Stage 7
<p>표적단백질 분석 개량 목표 설정</p> <p>소비자의 표적단백질 분석 소비자 요구에 따른 목표*설정</p> <p>* 안정성, 활성, 결합력, 특이성, 선택성, 발현도 용해도, 흡광도, 색 등</p>	<p>소비자 요구 분석 I</p> <p>단백질의 열안정성, 프로테아제 안정성 분석 제공</p> <p>특정 안정성에 대한 강화/약화 변이체 제공</p> <p>효소-기질 활성을 높일수 있는 변이체 제공</p> <p>항체-항원 결합을 높일수 있는 변이체 제공</p>	<p>소비자 요구 분석 II</p> <p>효소-기질 선택성 분석 및 특정 기질에 적합한 변이체 제공</p> <p>단백질 발현도 예측값 및 향상 변이체 제공 (E.coli, Yeast)</p> <p>단백질 흡광도 예측 및 최대 흡광도/색을 바꾼 변이체 제공</p>	<p>정량적 물성 예측 I</p> <p>인공지능 및 기계학습을 통해 단백질 변이체들의 물성에 대한 정량적인 예측</p> <p>예측된 물성을 기반으로 우선순위 선정</p>	<p>정량적 물성 예측 II</p> <p>분자역학 및 양자역학을 통해 단백질 변이체들의 물성에 대한 정량적인 예측</p> <p>예측된 물성을 기반으로 우선순위 선정</p>	<p>표적 단백질 변이체 제공</p> <p>컴퓨터기반 단백질 디자인모듈(CARPET)을 활용하여 소비자 요구가 개선된 새로운 단백질 변이체 제공</p>	<p>신규 단백질 DB 제공</p> <p>컴퓨터기반 단백질 디자인모듈(CARPET)을 활용하여 소비자 요구가 개선된 새로운 단백질 DB 제공</p>

서비스(Stage1~7)

FloraGenesis

천연물 소재 분석, 개발, 활용을 위한 AI 기반의 원스톱 서비스 플랫폼



바이오 DB 구축 서비스

바이오 데이터를 수집, 분석하여 유용한 정보를 추출하고 DB를 구축하여 관련 정보시스템을 구현하고, 관리하는 서비스



Raw Data
Digitalization
into Database

Chem & Bioinformatics 분야 데이터 전문성

• 생물정보 + 화학정보 확보, 처리, 분석, 활용((Q)SAR 등) 관련 25년의 노하우

관련 정보 시스템 구현/관리 경험

- 다수의 DB 및 서비스 시스템 구축 경험
 - 고에너지물질 DB(HEMDB)구축 및 운영
 - 한국화학연구원 화학소재정보은행(CMiB) 구축 및 업데이트
 - (KTR 데이터 활용 제안) 등 다수

기존 데이터베이스의 가용성 극대화

해당 기관의 데이터 확보 및 축적의 체계화

ML/AI 도입을 통한 차세대 활용방안 구축

독성정보 예측 및 활용 서비스

다수의 환경 독성 예측 기법을 개발하고 활용하여 독성정보를 예측하고, 스크리닝을 제공하여 신규 독성에 대한 대응 전략 및 규제정책에 활용하는 서비스

REQUESTS & PROJECTS

Prediction Packages

Statistical / Expert Model Predictions

Prediction Packages

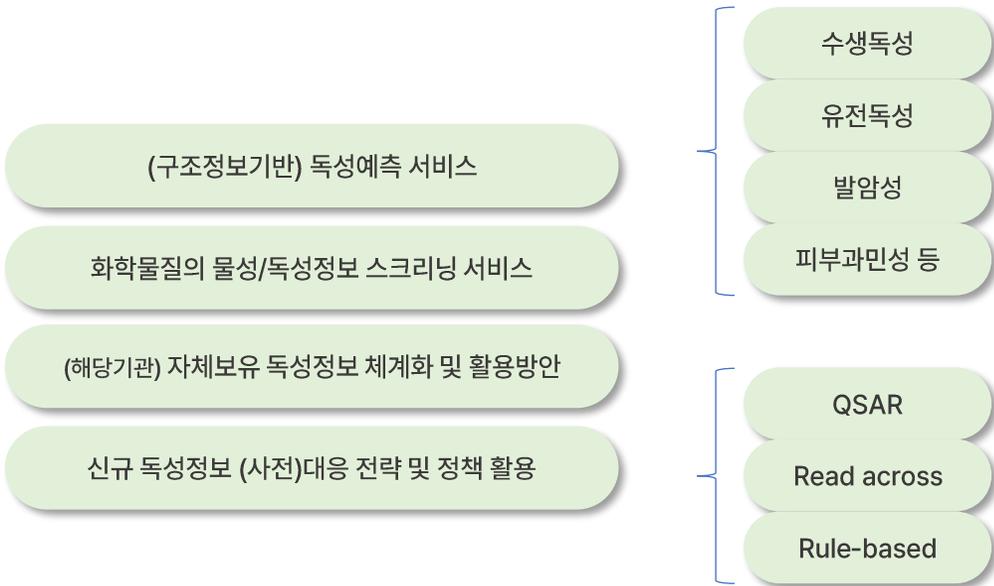
+

다년간에 걸친 예측기법 개발/운영 노하우

- PreADMET
- 다수의 환경독성 및 나노독성 예측기법 개발 및 활용
- 주요 맞춤형 독성예측 운영환경 구축

관련 기관과의 지속적인 과제수행

- 다수의 예측기법 개발과제 수행 (환경독성, 인체독성, 나노독성)
- 다수의 환경부/환경산업기술원/환경과학원 주관 정책과제 수행
 - 산업을 위한 (Q)SAR 해설서
 - QSAR TOOLBOX (V4.2) 활용 지침서
 - 기타 정책결정 지원을 위한 결과물 다수
- 비시험 독성정보 확보 다수의 자체/위촉 교육 수행
 - 환경산업기술원: 고용연계 환경기술 전문인력 양성과정
 - 화학물질관리협회: 화학물질 등록평가 전문인력양성교육 등



양자컴퓨팅 활용 연구개발





Bioinformatics & Molecular Design Research Center

contact us

위치 : 인천광역시 연수구 송도과학로 85, 진리관A동 209호

대표전화 : 032-212-9550 FAX : 032-212-9572

E-mail : support@bmdrc.org / manager@bmdrc.org

