

Life Science Product Guide

Target Validation, Hit Identification,
Lead Discovery 및 Optimization의 통찰력을 위한
소분자 약물 및 바이오펜릭스 설계 플랫폼



Schrödinger

Hit Discovery를 위한 다양한 워크플로우

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

구조 기반 가상 스크리닝

새로운 리간드 도킹

3차원 수용체 구조와 결합 예상 부위를 바탕으로
화합물의 결합형태와 결합력 예측

시장에서 충분히 검증된 도킹 알고리즘을
기반으로 사용하기 쉬운 모델링 지원

> [Glide](#)

도킹 및 머신러닝을 통한 Billion+ Library 가상 스크리닝

Glide docking과 머신러닝을 결합한 자동화
워크플로우를 통해 보다 빠르고 효율적으로
수십억 개의 화합물 및 아이디어 스크리닝

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

Hit enrichment rate 향상

Advanced sampling 및 scoring 방법을 사용하여 가상 스크리닝의 품질 개선

> [Glide WS](#)

리간드 기반 가상 스크리닝

Pharmacophore를 사용한 스크리닝

생물학적 활성이 알려진 분자의 입체적/전자적
특성을 기반으로 화합물을 신속하게 스크리닝

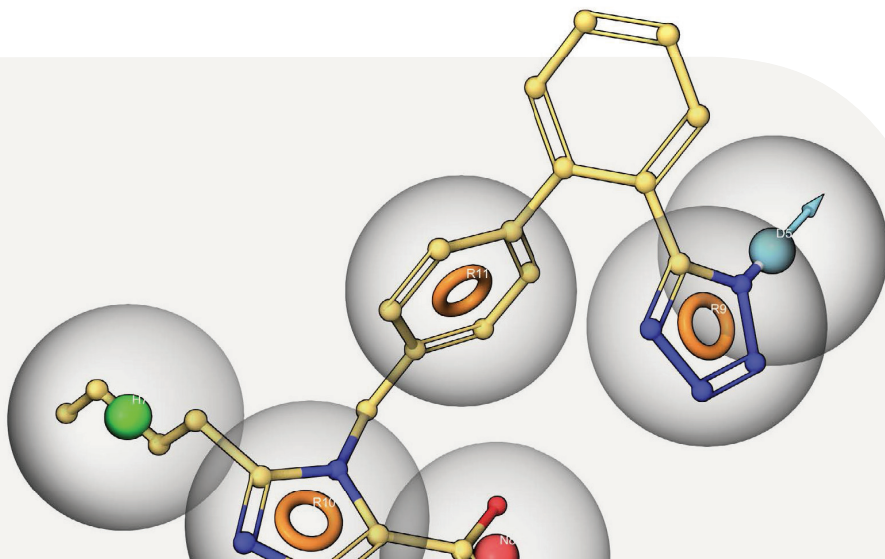
리간드 구조 이외에도 수용체 또는 복합체 기반
pharmacophore 생성 지원

> [Phase](#)

3D Ligand Shape을 사용한 스크리닝

활성이 알려진 리간드 구조의 3D shape을
기반으로 다양한 화합물을 빠르게 스크리닝

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



정확한 리간드 준비

정확한 이온화 상태 및 토토머화를 포함한 생물학적 활성 리간드 구조를 신속하게 생성하여 관련 히트에 대한 식별 확률을 높입니다.

리간드 준비

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

> [LigPrep](#)

Knowledge-based pKa 예측

강력한 알고리즘을 사용한 pKa 예측
경험적 방법(Epik Classic) 및 머신러닝(Epik 7)
기반 알고리즘 제공

> [Epik](#)

준비된 화합물 라이브러리를 이용한 스크리닝

Enamine, MolPort, Sigma Aldrich, Wuxi 및 Mcule 에서 준비된 1000만~10억개의 화합물 라이브러리*를 활용해 신속한 가상 스크리닝 시작 가능

* 별도 구매를 통해 화합물 라이브러리 사용가능

QM-based pKa 예측

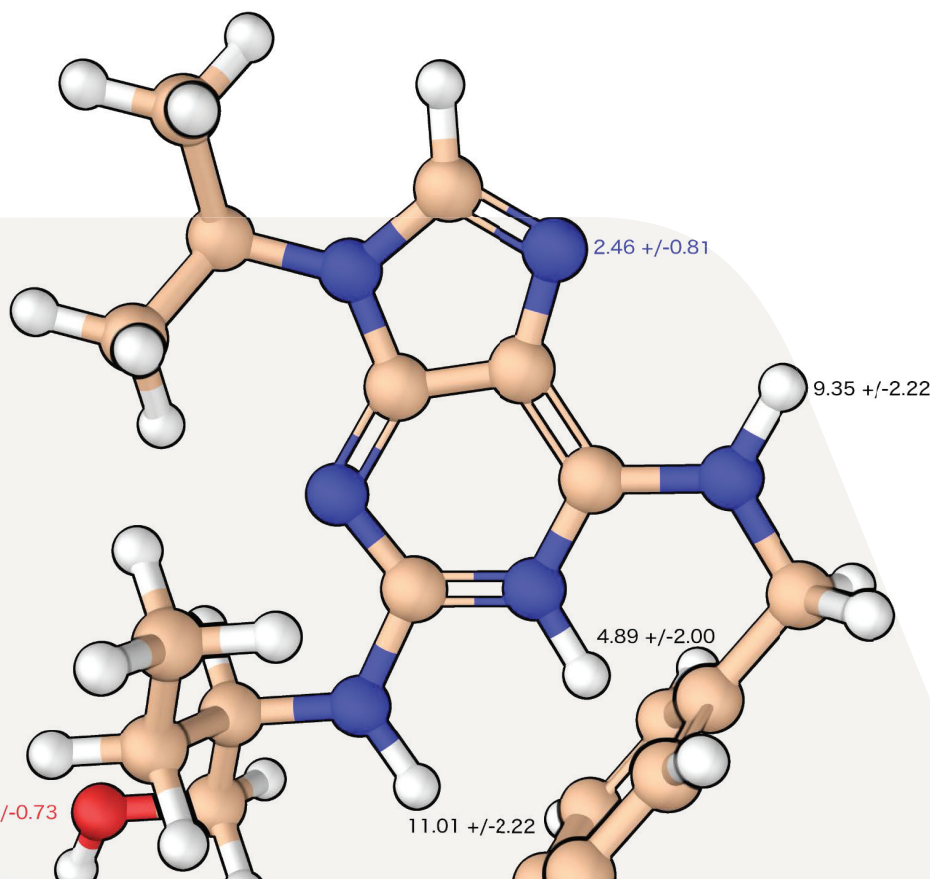
정확도 높은 양자역학 접근 방식을 사용하여 분자의 pKa 예측

> [Jaguar](#)

Conformation Analysis을 위한 앙상블 생성

보다 정확한 리간드의 생물학적 활성 형태를 예측하기 위한 화학적 공간 탐색 수행

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



Lead Optimization

빠르고 다양하게 구조를 생성하고 강력한 예측 모델링으로 결합력을 정밀하게 평가하여 최적의 신약 후보물질을 디자인합니다.

정확하고 신뢰할 수 있는 Affinity 예측

Binding Affinity 예측

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

> FEP+, OPLS

Hit-to-Lead 및 Lead Optimization 라이브러리 디자인

Enumeration을 통한 광범위한 화학적 공간 탐색 및 확장

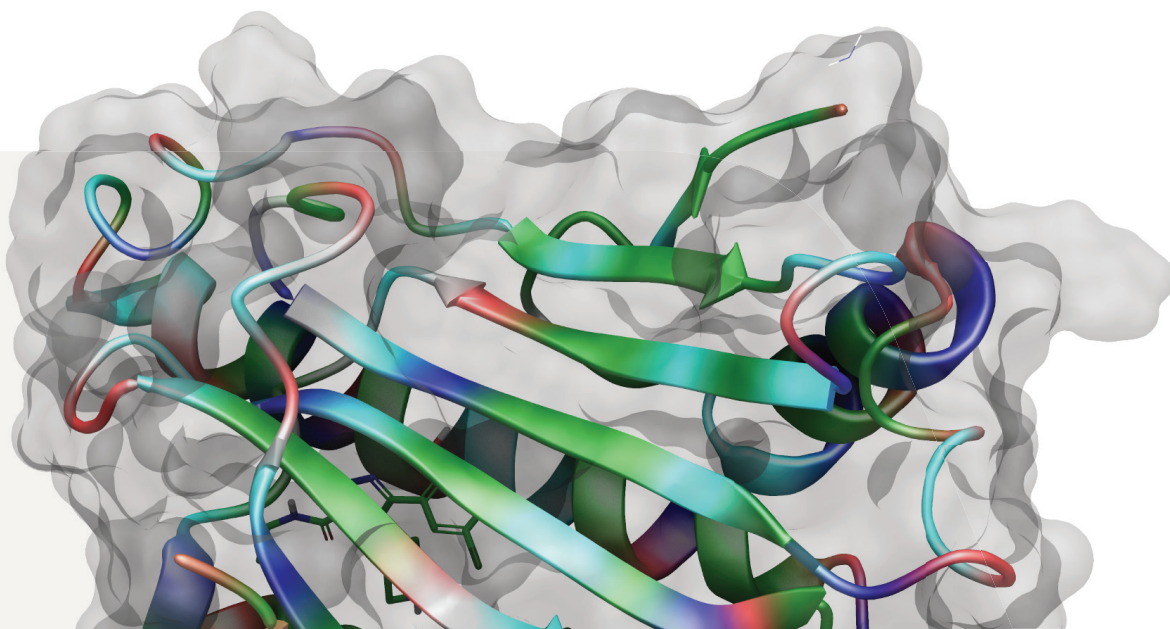
다양한 enumeration 기술을 활용하여 확장된 화학적 공간에서 후보 분자들을 신속하게 생성

> Core Hopping, R-Group Enumeration, PathFinder, Hit Expansion, Bioisostere Replacement

쉽고 간단한 라이브러리 디자인

2D/3D 화학 구조로부터 직접 설계하거나 직관적인 워크플로우를 통해 신규 물질 아이디어를 신속하게 생성

> Ligand Designer, LiveDesign



정확한 특성 예측

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

데이터 기반의 구조 선별을 위한 MPO 구축

사용자 정의가 가능한 Multiple parameter optimization(MPO)를 활용하여 신약개발 과정의 물질 우선순위 결정 지원

> [LiveDesign](#)

Affinity, Selectivity 및 Solubility 예측

리드의 drug-like 특성을 개선하는 자유 에너지 섭동 기법을 활용하여 리간드의 affinity, selectivity 및 solubility를 정교하게 예측

> [FEP+](#)

막 투과성 예측

정확한 물리학 기반 접근 방식으로 수동적 막 투과성 예측

> [Membrane Permeability](#)

전문가 수준 QSAR/QSPR 모델 생성 및 적용

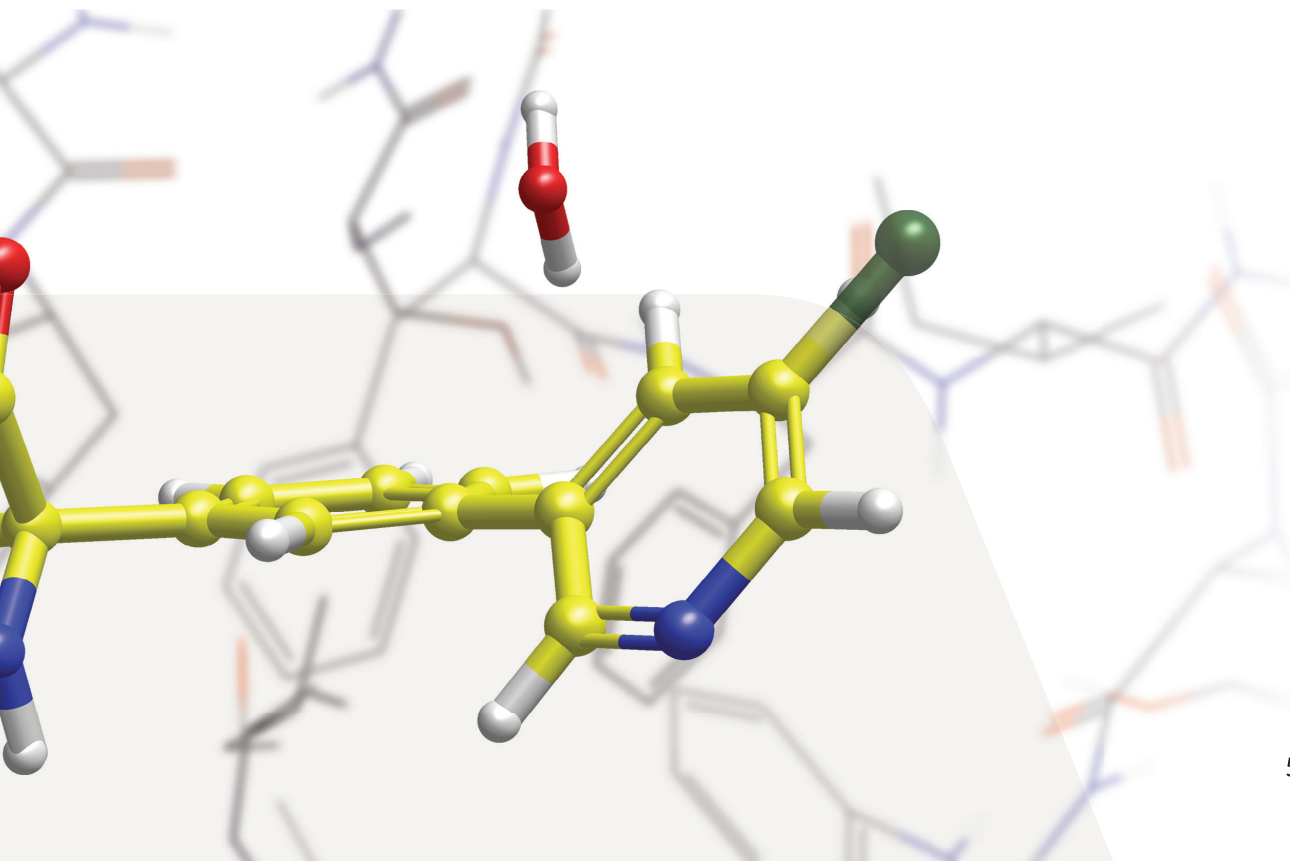
딥러닝을 포함한 다양한 머신러닝 기술을 사용하여 예측 모델을 자동으로 생성하고 적용 가능

> [AutoQSAR, DeepAutoQSAR](#)

Reactive Chemistry에 대한 통찰력 확보

QM/MM 접근 방식을 활용하여 covalent inhibitor의 반응성 화학과 전이 상태 간의 상호작용을 심도 있게 분석

> [QSite](#)



Target Enablement

빠르고 다양하게 구조를 생성하고 강력한 예측 모델링으로 결합력을 정밀하게 평가하여 최적의 신약 후보물질을 디자인합니다.

Homology Modeling

구조 기반 시뮬레이션을 위한 상동성 모델 생성

타겟 단백질의 상동성 모델을 만들기 위해
유전학적 서열정보가 유사한 템플릿을 탐색하고 이를 기반으로 구조 생성

[> Prime](#)

Experimental Structure Refinement

구조 개선을 통한 단백질 모델의 신뢰성 향상

구조의 일반적인 문제들을 수정할 수 있는
도구를 제공하여, 신뢰할 수 있는 all-atom
단백질 모델을 생성함으로써 후속 계산의
정확도 향상

[> Protein Preparation Workflow](#)

단백질 결정 구조 보완

정교한 구조 기반 약물 설계를 위하여 단백질
결정 구조를 정확하게 분석하고 수정하여
정제된 구조 구축

[> PrimeX](#)

Force Field와 Phenix를 결합한 구조 개선

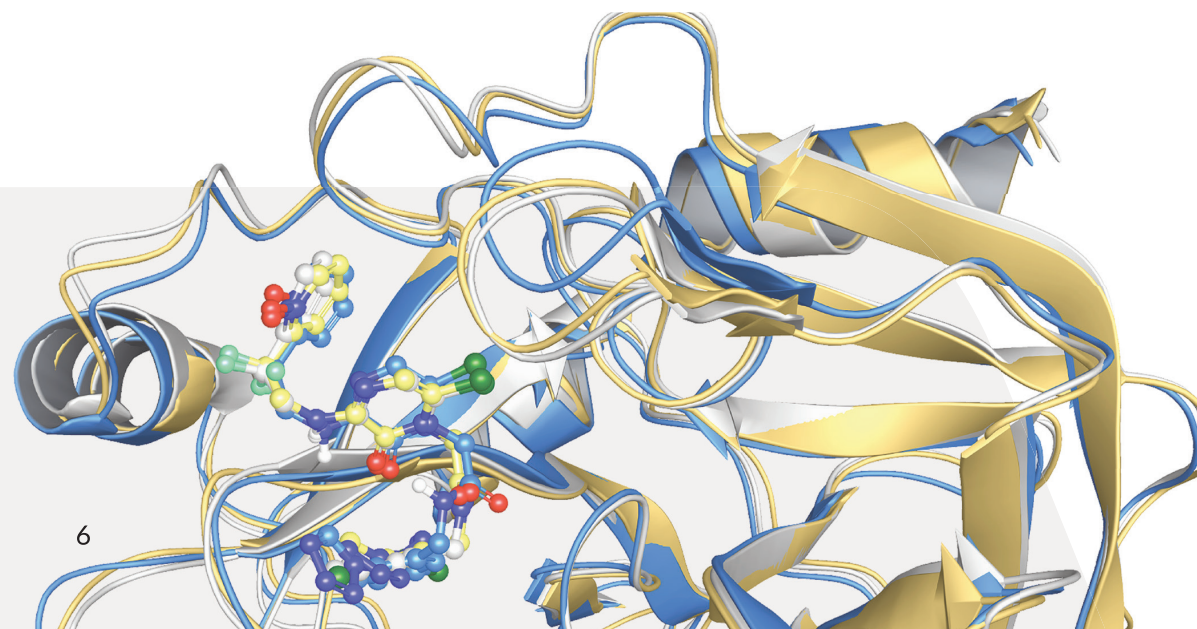
OPLS force field와 더불어 널리 인정받는
단백질 구조 결정 및 개선 패키지인 Phenix를
사용하여 구조 개선

[> OPLS/Phenix](#)

극저온 전자현미경(Cryo-EM) 구조 내의 리간드 포즈 개선

Cryo-EM 포텐셜 맵을 Glide에 적용하여
Cryo-EM 구조의 리간드 구조 배치를 개선

[> GlideEM](#)



정밀한 결합 포즈 검증을 위한 IFD-MD

새로운 단백질-리간드 복합체 예측 및 정밀한 상동성 모델 개선

차세대 도킹 기술인 Induced-fit docking 워크플로우(IFD-MD)를 활용해 새로운 리간드 스캐폴드에 최적화된 단백질 구조를 신속하게 확보

> [IFD-MD](#)

결합 부위 및 구조 분석 수행

결합 부위에 대한 druggability를 탐색하고 잠재적인 상호작용을 분석하여, 리간드 최적화를 위한 새로운 아이디어를 제시합니다.

결합 포켓 식별

표적의 잠재적 결합 부위를 식별하고 druggability 및 특성을 평가

> [SiteMap](#)

수화 부위 분석

결합 부위 내 수화 위치와 열역학적 포텐셜을 예측해 리간드 최적화의 새로운 가능성을 발견

> [WaterMap](#)

분자 거동의 이해

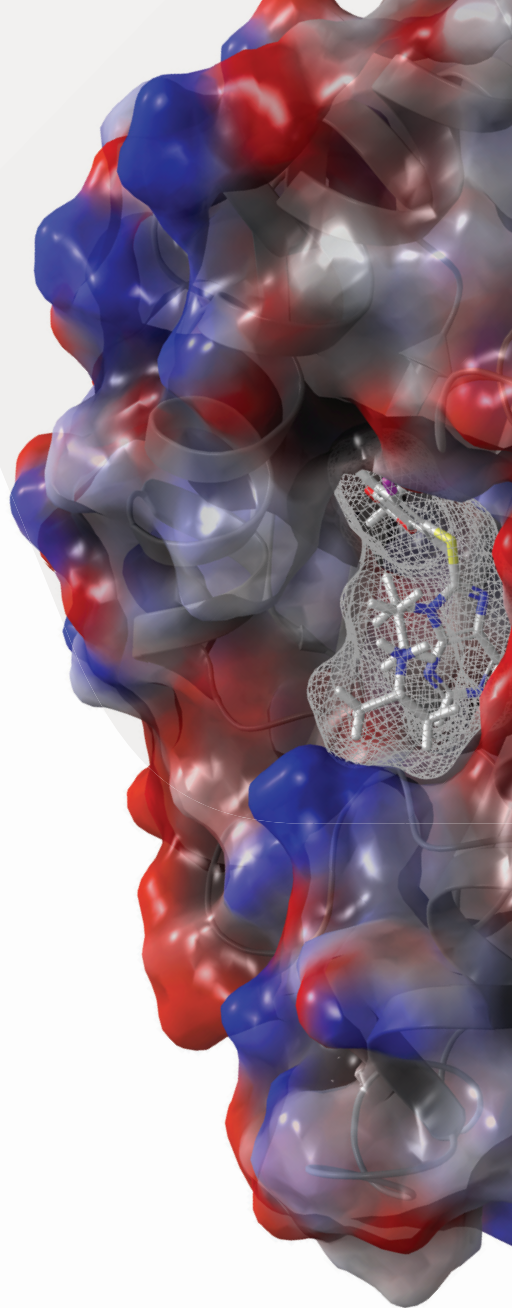
고성능 분자 동역학 엔진을 활용해 동적 현상을 예측하고 분자 운동을 연구

> [Desmond](#)

가려진 결합 부위 탐색

혼합 용매 분자 동역학과 MetaDynamics 가속 샘플링 워크플로우로 가려진 결합 포켓과 결합 핫스팟을 규명

> [Desmond](#)



디지털 바이로직스 설계*

최첨단 분자 모델링 기술을 활용하여, 단일클론 항체, 백신 항원, 효소, 펩타이드를 포함한 고품질 바이오제제를 효율적으로 설계할 수 있습니다.

단백질 구조 예측, 개선 및 동역학

단백질 구조를 예측하고 de novo CDR loop sampling 기능을 활용하여 항체 구조 예측

Single-domain, homo-multimers, hetero-multimers, chimeric 구조에 대한 모델을 구축하고 거대 생체 분자의 구조적 변화나 거동을 확인하기 위한 분자 동역학 워크플로우 수행

> [Prime, Desmond](#)

돌연변이 유발 시뮬레이션 기반 단백질 설계

분자역학 기반의 MM-GBSA를 통한 폭넓은 돌연변이 탐색과 자유에너지 섭동 기법을 통한 affinity, selectivity 및 solubility에 대한 돌연변이의 영향을 정밀하게 예측

> [Prime, FEP+](#)

단백질 상호작용 예측 및 분석

단백질-단백질 도킹을 통한 선호되는 복합체 구조 탐색 및 탐색된 구조의 interface 개선

쉽게 사용 가능한 그래픽 사용자 인터페이스로 예측된 단백질-단백질 상호 작용 조사 및 분석

> [PIPER, Prime](#)

단백질 불안정성(Liability) 탐색

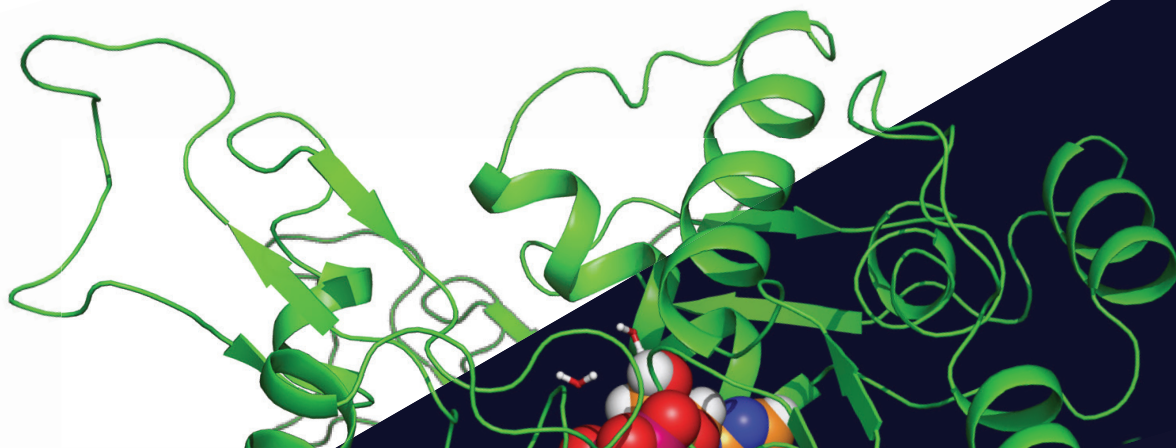
단백질 번역 후 변형, 화학적 반응 가능성 부위 탐색 및 단백질 표면 분석을 통한 응집 가능성 핫스팟 예측으로 잠재적 liability 분석하여 구조 개발의 위험성에 대한 사전 탐지

> [Prime](#)

항체 설계 및 Humanization

Targeted residue mutation 시뮬레이션과 CDR grafting 을 통해 antibody humanization 수행 및 humanness 비율 평가

> [Prime](#)



분자 및 열역학적 특성 분석

Desmond를 사용한 all-atom 및 coarse-grained 분자 동역학 시뮬레이션을 수행하여, 생리학적 환경에서 거대 분자의 열 운동 및 분자 상호 작용을 탐색

Replica exchange 및 MetaDynamics를 활용하여 자유 에너지 장벽을 극복하고, 다양한 온도와 집합 변수 공간에서의 구조적 샘플링 강화

> [Desmond, MS CG](#)

융합 단백질 및 링커 설계

라이브러리 기반 예측 또는 물리학 기반 루프 예측 기법을 활용하여 두 단백질의 말단을 연결하는 다양한 길이 및 아미노산 조성을 가진 링커 후보 탐색/설계

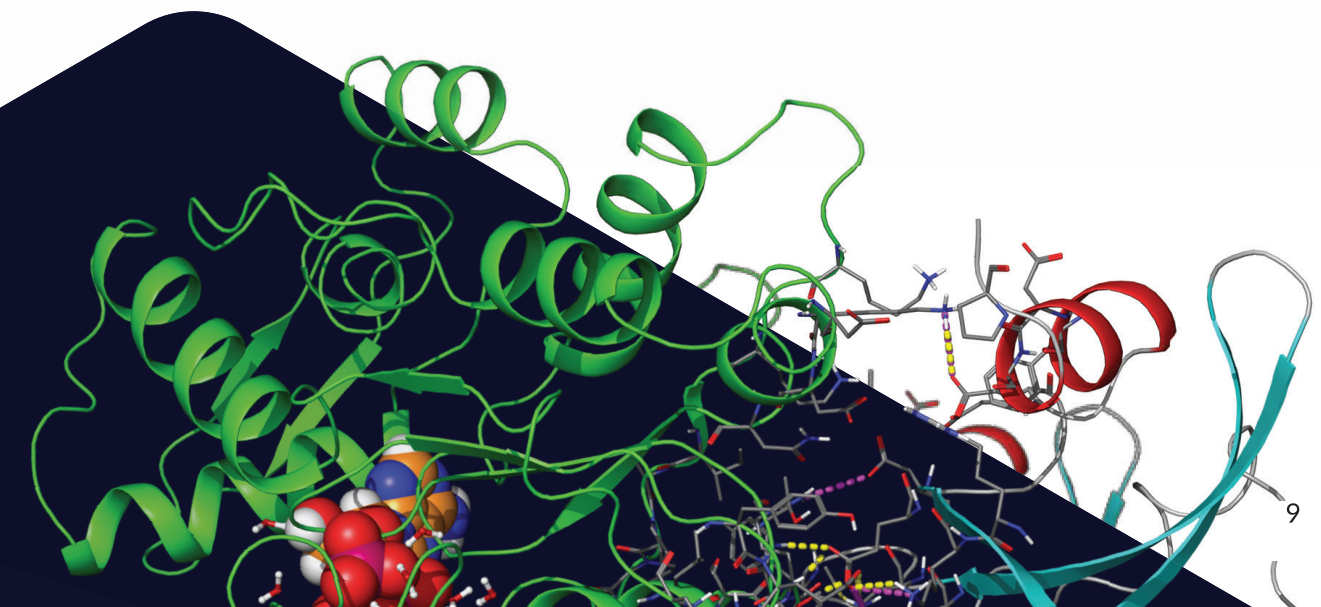
> [PIPER, Prime, Desmond](#)

서열 시각화 및 분석

3D 구조와 연동된 단백질 및 핵산 서열을 불러오기 및 시각화와 손쉬운 조작

Multiple Sequence Viewer를 활용한 빠른 정렬, 주석 처리를 지원하며 포괄적인 서열 특성 설명자 생성 지원

> [BioLuminate](#)



Product Licenses and Token Usage for Schrödinger Release 2025-1

SMDD

Bio

Advanced

of Token(s)

Shape Screening ^{1,8}	AutoQSAR ²	ConfGen ¹	Phase ⁵	Membrane Permeability ⁸
Jaguar-pKa ³	Epik ¹	Glide ²	Prime ⁸	LigPrep ¹
Jaguar ²	SiteMap ¹	Macro Model ⁵	BioLuminate	PIPER
Macro-pKa	FEP+	WaterMap	Desmond	IFD-MD
Jaguar Spectroscopy	Active Learning	LiveDesign	MS CG	MS Maestro

Main Protocol

Protein Preparation

Ligand Designer

Membrane Permeability (+QikProp)

Covalent Docking

IFD-MD

Protein-Protein Docking

Antibody Structure Prediction

Antibody Humanization

Residue Scanning

Advanced Technologies (Require Additional Licenses)

FEP+

약물 발견을 위한 고성능 물리 기반 자유 에너지 섭동 계산 솔루션

FEP+는 단백질-리간드 결합을 실험적 방법에 준하는 정확도로 시뮬레이션 하기 위한 독점적 물리 기반 자유 에너지 섭동 기술입니다. 이외에도 돌연변이에 따른 안정성 및 affinity 변화를 예측하고, 단백질의 pKa, 소분자의 solubility와 같은 특성을 예측할 수 있습니다.

Desmond

다양한 시스템의 동역학적 특성을 신속하고 정확하게 예측하는 분자 동역학(MD) 엔진

Desmond는 GPU 기반의 고성능 분자 동역학 엔진으로, 생물학적 시스템을 시뮬레이션하고 궤적을 시각화 및 분석하는 솔루션입니다. 이를 기반으로 MxMD, Meta Dynamics, Annealing 등의 여러 시뮬레이션 기법을 제공합니다.

WaterMap

결합 부위 물분자의 에너지를 평가하는 구조 기반 약물 설계 솔루션

WaterMap은 단백질 결합 부위의 물 분자에 대한 열역학적 분석을 통해, 수화 부위를 찾고 불안정한 물 분자를 식별합니다. 이를 바탕으로 약물 설계를 최적화하여 binding affinity를 향상시킬 수 있도록 지원합니다.

Glide WS

결합 부위의 물분자 정보를 활용한 새로운 도킹 솔루션

Glide WS는 Water Map의 정보를 활용하여 정확도를 더 높이고, 위양성을 줄이는 도킹 솔루션입니다. 불리한 물 분자 치환에 대해 충분한 보상이 없으면 패널티를 줌으로써 리간드의 결합 자세를 더욱 정밀하게 예측하며, 기존 Glide 결과를 개선할 수 있습니다.

IFD-MD

유연성이 큰 결합 부위의 정확한 리간드 결합 모드 예측

IFD-MD는 리간드 결합 부위 주변 측쇄 및 루프의 움직임 고려하여, 높은 정확도로 수용체-리간드 결합 포즈를 예측할 수 있습니다. 상동성 모델링, AI 예측 구조 등과 함께 활용하면 실험적 단백질 구조가 없는 경우에도 적용할 수 있습니다.

Macro-pKa

소분자의 이온화 및 화학종 분포에 대한 물리 기반의 pKa 예측

Macro-pKa는 소분자의 거시 상태 pKa 값과 pH 의존적인 토토머 분포를 예측하기 위한 자동화 솔루션입니다. Jaguar 기반의 양자역학계산(DFT)과 경험적 보정을 결합하여 예측함으로써 실험과 유사한 결과를 제공합니다.

Active Learning Applications

분자 발굴을 가속화하는 자동화된 머신러닝 모델 개선 기술

Active Learning Applications는 FEP+ affinity, Glide 도킹 점수와 같은 물리 기반 계산을 반복적으로 샘플링하여, 학습된 머신러닝 모델을 개선하는 강력한 도구입니다. Active Learning Glide, Active Learning FEP+, FEP Protocol Builder 등에 활용됩니다.

Jaguar Spectroscopy

양자역학 기반의 구조 의존적 분광 특성 시뮬레이션

Jaguar Spectroscopy는 소분자의 입체 구조를 특징하는 데 도움을 주는 고급 스펙트럼 시뮬레이션 도구입니다. MacroModel의 정밀한 구조 탐색 기능과 Jaguar의 양자역학 기반의 계산이 결합되어 더욱 정확한 예측(NMR, VCD/ECD 등)을 수행합니다.

Small Molecule Drug Design

SMDD

Phase

사용하기 쉬운 Pharmacophore 모델링 솔루션

Phase는 활성 약물의 입체적/전자적 특성을 기반으로 화합물을 평가할 수 있는 솔루션입니다. 가상 스크리닝을 위해 설계된 고유한 pharmacophore 인식 알고리즘을 사용하며, 단백질 구조가 없더라도 결합 부위에 대한 이해를 도울 수 있습니다.

SMDD

Shape Screening

초대형 화합물 라이브러리를 위한 리간드 기반 가상 스크리닝

Shape Screening은 활성 약물과의 shape overlap을 기반으로 리간드를 정렬하고 평가하는 강력한 가상 스크리닝 도구입니다. 기준 리간드와 토폴로지가 유사하지 않은 경우에도 활성을 가질 가능성이 있는 히트를 효과적으로 식별할 수 있습니다.

SMDD

ConfGen

정확하고 효율적인 활성 입체구조 탐색 솔루션

ConfGen은 분자의 화학적 공간상의 구조를 신속하고 정밀하게 생성하는 도구입니다. Force field 계산과 경험적 방법을 결합한 접근법을 사용하여 생물학적 활성을 가질 수 있는 안정한 구조를 신속하게 생성할 수 있습니다.

SMDD

Membrane Permeability

수동적 막 투과성 예측을 위한 물리 기반 솔루션

Membrane Permeability는 소분자가 막에 삽입될 때의 자유 에너지 변화와 더불어 막 환경에서 안정적으로 존재하기 위한 화학적 상태 변화에 필요한 에너지를 바탕으로 더욱 정밀하게 투과성을 평가합니다.

Glide

최고의 리간드-단백질 수용체 도킹 솔루션

Glide는 검증된 도킹 기술을 바탕으로 한 구조 기반 약물 설계를 위한 최고의 솔루션입니다. 가상 스크리닝, 결합 모드 예측 등을 통해 수용체와의 상호작용을 이해하고 분석함으로써 신약 개발 프로세스를 가속화 할 수 있습니다.

Prime

정확한 단백질 구조 예측을 위한 강력하고 혁신적인 솔루션

Prime은 상동성 모델링과 fold recognition을 통해 단백질 서열을 기반으로 신속하고 정확한 구조 예측이 가능한 솔루션입니다. 또한, MM-GBSA 기반 에너지 계산을 통해 관심 있는 시스템에 대한 구조적 안정성 평가를 제공합니다.

LigPrep

다양한 모델링에 필수적인 리간드 전처리 도구

LigPrep은 후속 모델링을 위한 강력하고 유연한 리간드 준비 도구입니다. 입력된 구조 정보를 바탕으로, 분자가 생체 환경에서 가질 수 있는 이온화, 토포머화, 고리 입체구조, 입체이성질체 등 다양한 상태를 반영한 3D 구조 생성을 지원합니다.

SMDD

DeepAutoQSAR

딥러닝 모델의 훈련 및 특성예측을 위한 자동화되고 확장 가능한 솔루션

DeepAutoQSAR는 화학 구조를 기반으로 분자의 특성을 예측할 수 있는 머신러닝 솔루션입니다. 최고 수준의 자동화된 워크플로우를 통해 초보자와 숙련자 모두가 정량적 구조-활성 관계(QSAR) 모델을 훈련시키고 결과를 예측할 수 있습니다.

Maestro

Molecular Discovery를 위한 모델링 플랫폼

Maestro는 직관적이고 모던한 그래픽 인터페이스를 가진 Schrödinger의 모델링 플랫폼입니다. 다양한 모델링 솔루션과 도구들을 단일 플랫폼에서 손쉽게 접근하고 활용할 수 있습니다.

BioLuminate

Biologics Discovery에 특화된 모델링 플랫폼

BioLuminate는 단백질 기반의 생물학적 신약 개발을 지원하는 통합 플랫폼입니다. 서열에서 구조에 이르기까지 생체 분자의 특성을 최적화하기 위한 예측 방법을 제공합니다.

Bio

Epik

신속한 pKa 계산 및 양성자화 상태 예측 도구

Epik은 리간드의 pKa 값을 예측하고, 주어진 pH 범위에서 존재할 수 있는 양성자화 및 토모어 상태를 생성합니다. 또한 머신러닝 기술을 활용한 Epik 7을 통해 거시상태의 pKa 값과 pH에 따른 다양한 양성자화 상태의 분포 예측도 제공합니다.

PIPER

최첨단 단백질-단백질 도킹 프로그램

PIPER는 단백질-단백질 결합 구조들을 예측하여 제공하는 다중 접근법과 수치 해석 기반의 프로그램입니다. 고속의 단백질 배향 샘플링을 통해 빠른 탐색을 수행하며 단백질 표면의 다양한 원자 간 상호작용을 정밀하게 평가합니다.

Bio

SiteMap

빠르고 직관적인 결합 부위 식별 도구

SiteMap은 단백질의 예상되는 결합 부위를 자동으로 탐색하고 druggability를 평가하는 도구입니다. 탐색된 영역을 특성(소수성, 친수성, 수소 결합 부위 등) 별로 세분화하여 평가하며 탐색한 결합 부위를 시각화 할 수 있습니다.

OPLS Force Fields

정확한 분자 시뮬레이션을 위한 최신 Force Field

OPLS는 신약 개발 및 재료 과학 분야를 포괄하는 고도로 정확한 최신 force field입니다. 분자 시스템 내 원자 간 상호작용을 정밀하게 모델링하여 신뢰도 높은 분자 구조와 에너지 예측을 가능하게 하는 핵심 제품입니다.

MacroModel

범용적으로 사용 가능한 Force Field 기반의 분자 모델링 프로그램

MacroModel은 소분자 부터 단백질까지 여러 연구 분야에 활용할 수 있는 force field 기반 분자 모델링 프로그램입니다. 분자의 구조와 에너지를 깊이 이해할 수 있도록 다양한 기능을 제공하며, 여러가지 force field도 지원합니다.

Jaguar

분자 구조 및 특성예측을 위한 정확하고 빠른 양자역학 솔루션

Jaguar는 빠른 전자 구조계산을 통해 분자의 구조 및 특성을 예측하는 양자역학 기반의 솔루션입니다. 다양한 연구 분야에 활용되는 전이상태 구조 탐색, 분광학, pKa 등 DFT 기반의 다양한 특성 계산을 지원합니다.

CASE STUDY

Hit to development candidate in 10 months: Rapid discovery of a novel, potent MALT1 inhibitor

Digital chemistry platform provides scale and accuracy to drive high precision molecular design

8.2 billion

compounds
computationally evaluated

78

total compounds
synthesized in lead series

10 months

to discovery of
development candidate

“

The ability to leverage the computational platform to rapidly identify not just one, but several novel, highly potent series with well-balanced properties is unique in my many years experience in industry.”

— **Zhe Nie**, Project Lead
Executive Director, Medicinal Chemistry,
Schrödinger Therapeutics Group

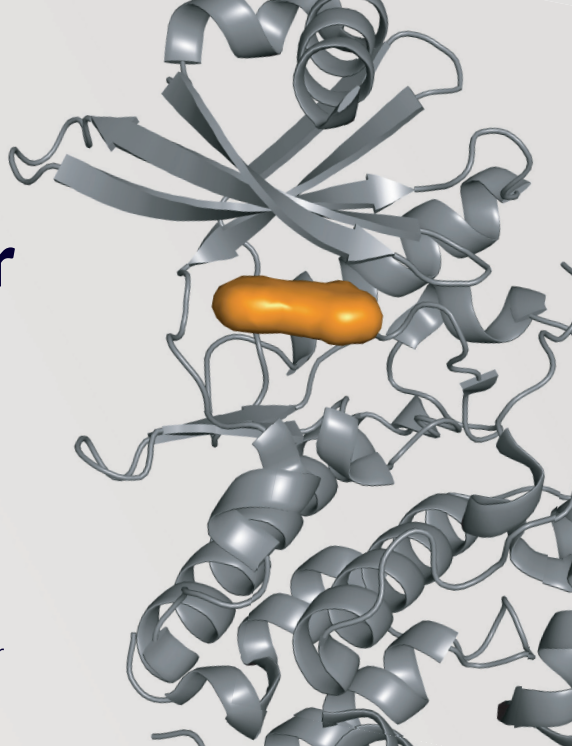
Target	MALT1, protease
Program Type	Schrödinger proprietary program, small molecule
Indication	Relapsed or refractory B-cell lymphoma, chronic lymphocytic leukemia
Stage	Phase 1 clinical trial



CASE STUDY

Design of a novel, potent CDC7 inhibitor candidate with high ligand efficiency and optimized properties

Use of a digital chemistry platform facilitates efficient multi-parameter optimization of selectivity, cell potency, and toxicity at scale



24K

compounds scored with rigorous physics-based modeling

226

total compounds synthesized

25 months

to discovery of development candidate

Through large-scale chemical space exploration with our digital platform, the team was able to overcome several key program challenges, including a potential liability in the lead series. A quick pivot led to the discovery of SGR-2921, which is the most potent CDC7 inhibitor reported to date and possesses strong drug-like characteristics.”

— Adam Levinson

Director, Medicinal Chemistry
Schrödinger Therapeutics Group

Target	CDC7, kinase
Program Type	Schrödinger proprietary program, small molecule
Indication	Hematological cancers and solid tumors
Stage	Phase 1 clinical trial



Schrödinger



과학 및 기술지원



기초과정과 전문과정의 사용자를 위해 설계된 교육자료

전문가 육성을 위한
방대한 교육자료 및 교육과정



과학적인 부분과 기술적인 부분을 아우르는 전문가의 지원 포함

업계 최고의 과학 및 기술지원을 위한
다양한 형태의 고객 지원 제공



다양한 컴퓨터 환경 지원

Linux, Windows, Mac 및 클라우드 기반
플랫폼 지원

Contact us: info-korea@schrodinger.com

Learn more: schrodinger.com



Schrödinger

Copyright © 2025 Schrödinger, Inc.