붙임1 **1:1네트워크 AI기술소개자료 양식**

(1) DeepMatcher: 합성신약 유효물질 발굴 & 선도물질 개발 및 최적화

<기본 정보>

MODALITY	■ 저분자치료제 □ 항체치료제 □ 유전자치료제 □ 세포치료제 □ 단백질치료제 ■ 기타(신생항원 기반 치료용 항암백신)
AI 적용과정	□ Target identification ■ Hit discovery ■ Hit to Lead □ Lead Optimization □ Pre-chlinical □ Clinical (Phase I, II, III) ■ 기타(신생항원 발굴 - 치료용 항암백신 개발용)
희망 파트너십	■ 공동연구 □ 투자 □ 합작투자회사 설립 ■ 기타(클라우드 기반 서비스)
기술요약	주요 플랫폼: **(1) DeepMatcher®: 합성신약 유효물질 발굴 & 선도물질 개발 및 최적화** 단백질-화합물 결합 원리를 학습한 AI 솔루션 • **DeepMatcher®-Hit**: 10억 여개에 달하는 화합물을 탐색하여 표적 단백질과 결합하는 최적의 유효물질 후보군(100여종)을 선별. 광범위한 화합물 데이터베이스 대상 탐색과 물리학 기반 예측으로 새로운 scaffold 발굴 가능성 향상 • **DeepMatcher®-Lead** 확보된 scaffold를 기반으로 유도체 디자인과 결합력 예측을 수행, 기능 향상이 예측되는 유도체를 선별 **(2) NEO-ARS®: 항암백신 및 T세포 치료제 개발을 위한 신생항원을 예측** 정상인 또는 암환자 자가 혈액을 이용하여 예측 신생항원의 면역원성 확인 • **암환자 개인맞춤 신생항원 예측** 파트너사가 모집한 암환자 종양/정상 조직 유전체 시퀀싱 데이터로부터 개별 암환자 맞춤 신생항원 후보 10여 종을 제시. 단기 용역 또는 장기 파트너십을 통한 개인맞춤 신생항원 항암백신 공동연구개발 가능. • **암환자 공통 신생항원 예측** 협의된 암종에 대하여 암유전체 데이터 베이스를 활용, 공통 암 특이 변이를 추출하고 고빈도 MHC 대립유전자형에 대한 신생항원 후보를 제시. 공동연구를 통한 공통 신생항원 후보 발굴 및 면역원성 검증 가능.

<기술 정보>

논문 또는 특허 **핵심기술 관련 3건만 기재**	1. **[DeepMatcher® 기술 특허]** 단백질 및 리간드 혹은 펩타이드에 대한 쿨롱 결합 모델 기반 결합 에너지 예측 방법 등 7건 출원 특허	(☐ 논문 ■ 특허출원 ☐ 특허등록)
	2. **[DeepMatcher® 도출 초기 신약 후보물질의 동물 효능 데이터 논문]** Kim et al. (2021) Deep learning model enables the discovery of a novel immunotherapeutic agent regulating the kynurenine pathway. OncoImmunology, 10:1	(■ 논문 ☐ 특허출원 ☐ 특허등록)
	3. **[NEO-ARS™ 기술 특허]** 인공지능모델기반 분자동역학 빅데이터를 활용한 신생항원 면역치료정보 제공 시스템 및 방법 (제 10-24066990000호)	(☐ 논문 ☐ 특허출원 ■ 특허등록)

<연구자 정보 및 기술관련 문의처>

연구자 기관명	㈜신테카바이오	**연구자명**	정종선 대표이사 · CTO
기술 담당자명	천민경 개발기획팀 사업개발 담당 차장	**담당자 연락처 및 이메일**	mgcheon@syntekabio.com 070-7663-0985

<기술 정보>

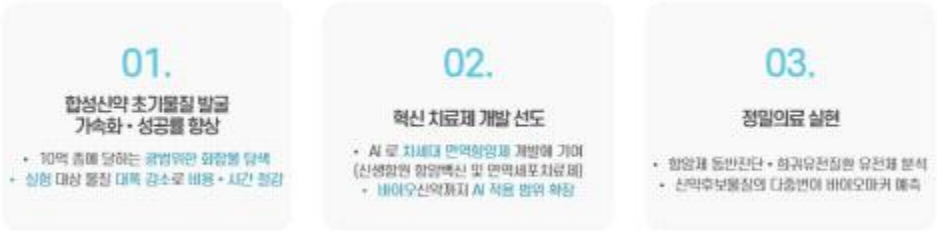
기업 개요

◯ ㈜신테카바이오 개요

회사명	(주)신테카바이오
대표	정종선
연혁	하단 표1 참조
사업모델	AI신약 플랫폼 개발 서비스 및 자체 신약파이프라인 개발
비즈니스모델	상동
담당자	천민경/비즈니스센터 차장 mgcheon@syntekabio.com/070-7663-0985

◯ 회사 미션 및 핵심 역량

- 미션: AI 신약개발로 새로운 패러다임 치료제 개발에 기여



- 핵심 기술력



◯ 주요 기술 AI 신약개발 솔루션

- 주요 AI 신약개발 솔루션인 DeepMatcher® 및 NEO-ARS™을 비롯하여 신약개발 전주기, 다양한 치료제 형태에 적용 가능한 AI 솔루션 구축



	○ 사업 목표 • AI 신약개발 플랫폼 및 유전체 정밀의료 플랫폼의 기술 서비스 제공 • AI 신약개발 플랫폼을 이용한 자체·공동 신약파이프라인 개발 및 기술이전을 통한 사업화
기술 개요	선별된 주요 플랫폼: ○ <u>DeepMatcher® (합성신약 후보물질 발굴 플랫폼)</u> • 단백질-화합물 결합 원리를 학습한 AI 솔루션으로 유효물질 발굴과 물질 최적화를 지원 • 물리학 이론에 입각한 결합력 예측으로 새로운 물질 발굴 가능성을 높였으며, 결합력 예측 시 최적의 결합자세 선별 과정이 수반되어 예측의 정확도를 크게 향상 • Kinase, GPCR, nuclear receptor 등 수백 종의 단백질에서 초기 후보물질을 발굴하는데 적용된 바 있음 • DeepMatcher®-Hit: 10억 여개에 달하는 화합물을 탐색하여 표적 단백질과 결합하는 최적의 유효물질 후보군(100여종)을 선별. 광범위한 화합물 데이터베이스 대상 탐색과 물리학 기반 예측으로 새로운 scaffold 발굴 가능성 향상 • DeepMatcher®-Lead: 확보된 scaffold를 기반으로 유도체 디자인과 결합력 예측을 수행, 기능 향상이 예측되는 유도체를 선별 ○ <u>NEO-ARS® (신생항원 예측 플랫폼)</u> • 항암백신 및 T세포 치료제 개발을 위한 신생항원을 예측 • 기존 알고리즘이 아미노산 서열을 기반으로 하고 있기 때문에 면역원성을 띠는 신생항원을 예측하는 데 한계가 있는 실정. NEO-ARS™는 실제 3차원 결합 환경의 분자동역학을 반영하여 더 높은 정확도로 신생항원 후보를 선별 • 면역원성이 알려진 신생항원 펩타이드 데이터로 평가 시 netMHC-pan4.0보다 우수한 면역원성 예측성능 확인 • 국내 병원과 연계하여 진행한 암환자 및 건강인 대상 전향적 인체유래물 연구를 통하여 예측된 신생항원 후보의 T세포 반응을 확인
기술 (파이프라인) 발표 희망 여부	N
미팅 희망 기업	종근당 ○ 합성신약 초기연구개발을 수행하는 국내 대형/중소형 제약사, 바이오벤처 ○ 치료용 항암백신 개발사 및 항암면역세포치료제 개발사