

CANDDIE™ | 고난도 막단백질 표적 특화 AI·MD 기반 신약설계 플랫폼



막단백질 모델링 | 결합친화도 및 신호전달 예측 | CADD 자동화

아토매트릭스

기술 및 사업 개요

아토매트릭스는 GPCR 을 포함한 고난도 막단백질 표적의 구조와 움직임을 계산으로 분석해 신약후보물질 선정을 지원하는 CADD 전문기업입니다. 자체 개발한 CANDDIE™는 막단백질 모델링, MD 기반 결합친화도 및 결합 후 신호전달 예측, CADD 계산 자동화의 세 가지 핵심 역량을 하나의 workflow 로 통합합니다.

기존 구조기반 CADD 가 주로 정적인 결합 가능성을 평가한다면, CANDDIE 는 막 환경과 단백질의 동적 거동, 약물 결합 이후의 구조 및 신호전달 특성까지 분석 범위를 확장합니다. 이를 통해 어떤 후보를 다음 합성이나 실험 단계로 가져갈지 판단하고, Lead 를 최적화하는 데 필요한 추가 근거를 제공합니다.

현재 국내 제약·바이오기업을 대상으로 표적 맞춤형 유료 B2B 신약설계 서비스를 제공하고 있으며, 실제 프로젝트에서 검증한 workflow 를 클라우드 기반 CANDDIE SaaS 로 제품화하여 국내외 고객이 고급 계산신약설계 기술을 보다 쉽게 활용할 수 있도록 사업을 확대하고 있습니다.

CANDDIE 3 대 핵심 기술역량

1 AI·MD 기반 막단백질 모델링	2 결합친화도 및 신호전달 예측	3 CADD 계산 자동화
- PDB 및 AlphaFold 기반 표적구조 정제 및 최적화 - GPCR 등 고난도 막단백질의 특성을 반영한 막 환경 및 계산시스템 구축 - 표적의 활성상태, 구조적 유연성, 막 환경을 반영한 신약설계용 구조모델 구축	- BARon™: MD 기반 결합친화도 예측 및 동적 결합 안정성 평가 - Alloper™: 약물 결합으로 유도되는 allostery 및 신호전달 관련 구조변화 분석 - 정적인 Docking score 를 넘어 후보물질의 결합 및 약리기전 차이를 해석하는 정보 제공	- 표적과 화합물 준비, Docking, MD, Post-MD 분석 및 결과보고 과정 자동화 - 수용성 단백질과 막단백질에 적용 가능한 통합 CADD workflow - 클라우드 SaaS 를 통해 사내 MD 전문인력과 GPU 인프라 구축 부담 완화

CANDDIE 가 특히 유용한 신약설계 영역

불완전하거나 고난도인 표적 구조	Docking 이후 후보물질 우선순위 선정	작용기전 중심의 후보 차별화
실험구조가 불완전하거나 적절한 활성상태가 불확실하고, 막 환경이 표적의 구조와 움직임에 영향을 주는 경우	유사 화합물이 비슷한 Docking pose 또는 score 를 보여, 결합 안정성과 상대적 친화도를 추가로 비교해야 하는 경우	결합친화도가 비슷한 후보 사이에서 biased agonism, allosteric modulation 또는 후속 신호전달 차이가 중요한 경우
막 환경을 반영한 표적 모델링 및 시스템 구축	MD + BARon™	Alloper™

CANDDIE 는 표적 구조, 약물의 동적 결합 특성, 결합 후 신호전달을 하나의 자동화 workflow 로 연결하여 후보물질의 우선순위 선정과 최적화를 지원합니다.

Post-MD 핵심 분석 엔진 | BARon™ & Alloper™

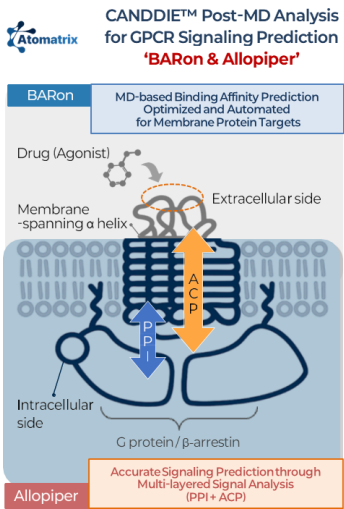
BARon™ | MD 기반 결합친화도 및 결합 안정성 예측

BARon 은 MD 계산으로 얻은 시간에 따른 약물-표적 복합체의 구조와 에너지 변화를 분석하여 결합 안정성과 상대적 결합친화도를 평가합니다. Docking score 만으로 후보물질 간 차이를 구분하기 어려울 때 보다 정밀한 우선순위 선정을 지원합니다.

Alloper™ | Allosteric 및 신호전달 관련 분석

Alloper 는 약물 결합으로 유도되는 단백질 구조변화와 내부의 allosteric communication 을 분석하여 결합 이후 신호전달과 관련된 기전 정보를 제공합니다. 특히 GPCR 프로젝트에서는 signaling selectivity, biased agonism, allosteric modulation 등 후보물질의 약리학적 차이를 해석하는 데 활용할 수 있습니다.

BARon 과 Alloper 는 실험을 대체하는 기술이 아니라, 어떤 후보를 우선 검증할지 결정하고 실험 가설을 구체화하기 위한 계산 기반 의사결정 지원도구입니다.



과학적 근거, 프로젝트 실증 및 사업화 성과

학술적 검증	프로젝트 실증	사업화 실적
- CADD, MD 및 관련 계산방법론 기반 SCI 급 논문 13 편 2025 년 관련 논문 3 편 발표, Chemical Science Hot Article 선정 포함 - GPCR 을 중심으로 다양한 단백질 표적군에서 연구 기반 축적	- 면역항암제 프로젝트: 424 중 중 272 종이 해당 프로젝트의 Hit 기준 충족 - GLP-1R 포함 이중표적 대사질환 프로젝트: 8 중 중 2 종이 Hit 기준 충족 - 각 결과는 해당 화합물군과 프로젝트별 평가기준에 따른 실증 사례	2026 년 국내 주요 제약·바이오기업 3 개사 대상 CANDIE 기반 유료 신약설계 프로젝트 수행 - 프로젝트 결과와 사용자 피드백을 계산 프로토콜, 알고리즘, workflow 고도화에 지속 반영

* 상기 결과는 각 프로젝트의 화합물군과 평가기준에 따른 사례이며, CANDIE 전체 플랫폼의 일반화된 예측정확도를 의미하지 않습니다.

기술 인프라 및 제품 개발

막단백질 모델링 및 시스템 구축 PDB 및 AlphaFold 기반 구조 정제, 누락 영역 보완, 표적 특성에 맞는 막 구성과 시뮬레이션 시스템 준비를 통해 GPCR 등 고난도 막단백질을 신약설계에 활용할 수 있는 모델로 구축합니다.	Screening 및 Docking 인프라 10 억 중 이상의 가상탐색용 화합물 자원에 자체 filtering 기술과 복수의 Docking 접근법을 적용하여 넓은 chemical space 를 탐색하고 후보물질의 우선순위 선정을 지원합니다.
분자동역학 계산 자동화 수용성 단백질과 막단백질 모두에 대해 시스템 구성, 용매 및 막 환경 설정, 평형화, MD simulation, Post-MD 분석으로 이어지는 계산과정을 자동화합니다.	CANDIE SaaS 제품화 GPU 연산, 고객 데이터 분리, 사용자 권한관리를 고려한 Azure 중심 cloud architecture 를 기반으로 실제 구동 가능한 CANDIE SaaS prototype 을 구축했습니다.

지식재산권 및 브랜드 보호

- CANDIE 핵심기술 관련 국내 특허 출원
- CANDIE 브랜드 관련 국내 상표 2 건 출원

학술적 근거 및 외부 검증

- SCI 급 논문 13 편: Chemical Science (2025), Journal of Molecular Graphics and Modelling (2023), Nature Communications (2022) 등 대표 연구성과
- 중소벤처기업부 TIPS R&D 및 Microsoft 글로벌 기업 협업 프로그램 선정

* 프로젝트별 성능 및 계산예측 결과는 연구 의사결정을 지원하기 위한 것으로 실험적 검증이 필요합니다. CANDIE 고도화와 함께 후속 IP 개발도 지속하고 있습니다.

아토매트릭스와의 협력 방식

아토매트릭스는 파트너가 이미 보유한 CADD 및 실험 workflow에서 필요한 영역만 보완하거나, 표적 모델링부터 MD와 Post-MD 분석까지 연결된 통합 계산신약설계 서비스를 제공할 수 있습니다. 신규 협력은 일반적으로 명확한 표적, 화합물군, 프로젝트 목표를 설정한 뒤 시작하며, 결과와 파트너의 필요에 따라 범위를 단계적으로 확대합니다.

1 Pilot / 기술 적합성 검증	2 표적 맞춤형 B2B 프로젝트	3 계산-실험 연계 공동연구	4 공동 신약발굴 프로그램
정의된 표적과 제한된 화합물군으로 시작 기술 적합성과 workflow 적용 가능성 확인	범위, 일정, 결과물을 명확히 한 유료 프로젝트 Hit 발굴 및 Lead 최적화 지원	CANDDIE 분석과 파트너 또는 CRO의 실험 연계 반복적인 계산-실험 평가를 통한 가설 및 후보물질 고도화	중장기 신약발굴 또는 공동개발 협력 사업조건은 프로젝트 특성에 따라 개별 협의

일반적인 프로젝트 진행 | 고객 입력부터 최종 결과까지

고객 제공정보	CANDDIE 분석 workflow					주요 제공결과
- 표적 단백질 sequence 및 확보된 구조정보 - 고객 보유 화합물군 또는 CANDDIE screening library	CANDDIE 의 세 가지 핵심기술을 표적과 프로젝트 목적에 맞춰 선택 적용					- 우선순위화된 후보물질군 - 결합친화도 예측 및 동적 안정성 평가와 순위
- 목표 MoA 및 프로젝트별 Hit/Lead 선정기준 - 활용 가능한 assay 및 pharmacology 데이터	표적 정보	AI-MD 기반 표적 모델링	Drug-ready Library / DB	Docking	MD 기반 후보 우선순위화	- 필요 시 목표 MoA 및 신호전달 관련 기전 분석 - 후속 실험 제안을 포함한 프로젝트 결과보고서
	자동화 MD / Post-MD 분석		BARon™ 결합친화도 예측 및 동적 안정성 평가			
			Allopipe™ 필요 시 allostery 및 신호전달 관련 분석			

사업화 로드맵

현재	2026년 4분기	2027년 1분기 이후
유료 B2B 신약설계 서비스 Pilot 및 표적 맞춤형 프로젝트	CANDDIE SaaS Beta 선정 사용자 테스트 및 workflow 검증	CANDDIE SaaS 정식 서비스 구독형 서비스 개시 및 글로벌 파트너십 확대

협력은 Pilot에서 유료 프로젝트로, 이후 SaaS 도입 또는 중장기 공동개발로 확대할 수 있으며, 프로젝트 결과와 파트너의 목표에 따라 가장 적합한 형태를 선택합니다.

핵심 경영진 및 연락처

이은호, Ph.D. Founder & CEO - 저분자 신약개발, R&D 리더십 및 기술사업화 분야 27년 경력으로 다학제 신약개발 프로그램을 수행하고 총괄 - FDA 승인 뇌전증 치료제 XCOPRI®(cenobamate) 공동 발명자로 후보물질 발굴, Lead 개발 및 비임상 R&D 경험 보유	이상배, Ph.D. VP & CTO - CADD, 분자모델링 및 MD 기반 신약설계 분야 29년 경력으로 City of Hope에서 GPCR 연구를 수행하고 막단백질 구조, 동역학, 신호전달 연구경험 축적 - CANDDIE 핵심 개발을 총괄하며 막단백질 모델링, MD 자동화, BARon™ 결합친화도 분석, Allopipe™ allostery 및 신호전달 관련 분석기술 개발을 주도	연락처 WEB www.atomatrix.co.kr MAIL ehlee@atomatrix.co.kr PHONE +82-10-3734-2942
--	--	---

신약 후보물질의 발굴과 개발, R&D 사업화 경험에 CADD, GPCR, 분자모델링 및 계산플랫폼 개발역량을 결합한 상호보완적 리더십을 갖추고 있습니다.

귀사의 관심 표적 또는 신약개발 프로젝트에 CANDDIE™가 어떻게 기여할 수 있을지 함께 논의하기 위한 기술 및 사업 미팅을 제안 드립니다.