



# KCB

newsletter

한국화학물은행 뉴스레터  
2026년



# 한국화학물은행 뉴스레터 2026

발행일 : 2026년 4월  
 발행인 : 이영국  
 편집인 : 조남철  
 발행처 : 한국화학물은행

한국화학물은행은 국가연구개발사업의 화학물 연구성과 관리·유통 전담기관으로 지정되어 있습니다.  
 [과학기술정보통신부 고시 제2022-41호]

## CONTENTS

한국화학물은행 소식	신약개발 현장 활용성을 강화한 PPI 라이브러리 구축	3
	화학물 분양 제도 및 운영 기준 개편 안내	6
	연구데이터 활용 시 기반 신약개발 경진대회 운영 성과	8
	주요 방문 인사 및 교류 현황	10
한국화학물은행 주요 현황	화학물 보유 현황	11
	화학물 정보 제공 및 활용	12
	연구 성과 및 확산 - 한국화학물은행 활용 논문(2025년)	13
기고문	AI 신약개발의 현황 · 전망과 전략적 접근 방안	15
	- 한국제약바이오협회 AI 신약연구원 원장 표준희	
활용자 안내	화학물 기탁 절차	30
	데이터 활용 절차	31
	화학물 활용 절차	32
	화학물 및 데이터의 활용 결과(논문, 특허 등) 권리관계 규정	33
	사전제작(Pre-made) 라이브러리 종류	34

한국화학물은행은 국내에서 합성되는 화학물(유기화학물 및 천연물) 및 관련정보를 범국가적으로 수집·관리하고 공동으로 약효시험에 활용함으로써 국내 신약개발 및 바이오 연구를 지원하기 위하여 2000년에 설립되었으며 78만종 이상(2025년 12월 31일)의 화학물을 확보하고 있습니다.

## 신약개발 현장 활용성을 강화한 PPI 라이브러리 구축

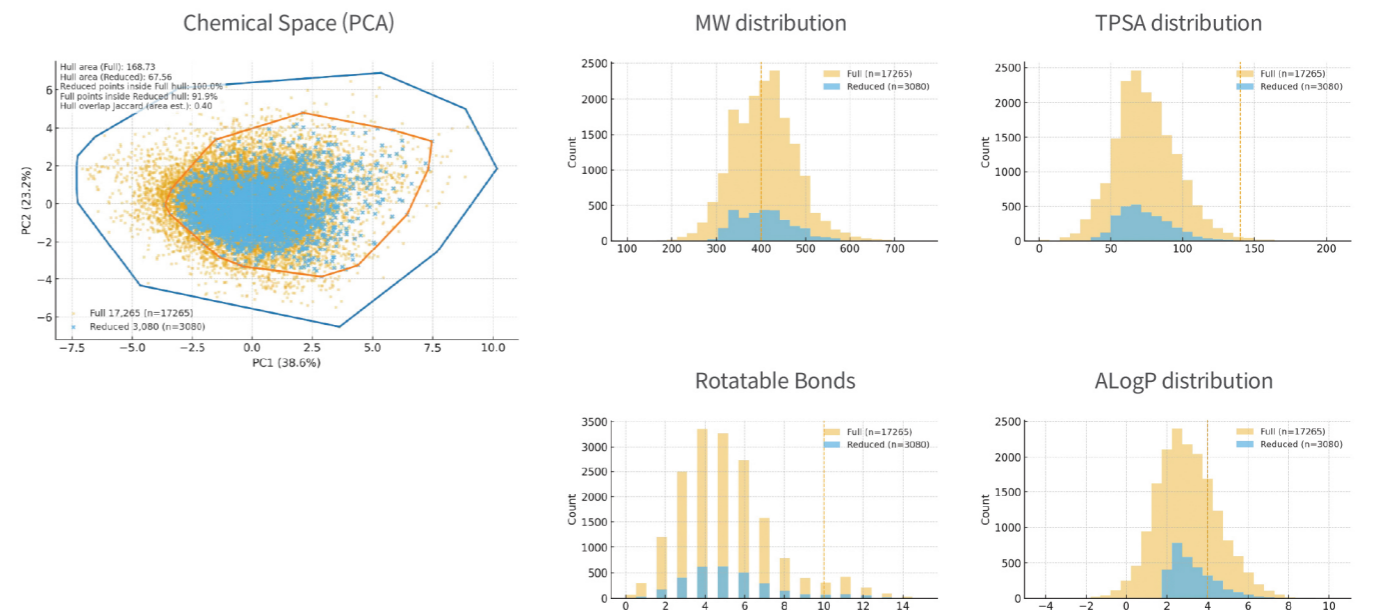
한국화학물은행은 단백질-단백질 상호작용(PPI, protein-protein interaction) 기반 신약개발 연구의 실질적 활용성을 높이기 위해, 기존 PPI 라이브러리를 분석하여 소규모로 재구성하고, 구조 기반 peptidomimetic PPI 라이브러리를 신규 구성하였다. PPI는 세포 내 신호 전달과 생물학적 기능 조절의 핵심 기전으로, 신약개발에서 중요한 표적임에도 불구하고 결합 표면이 넓고 평탄하여 전통적인 저분자 화합물 접근이 어려운 영역으로 인식되어 왔다. 이에 따라 한국화학물은행은 PPI 표적 연구에 적합한 화합물 선별과 활용 효율을 높이기 위해, 구조적 특성과 결합 모드를 고려한 라이브러리 재구성을 추진하였다.

### PPI 라이브러리 재구성

기존 PPI 라이브러리의 활용성을 제고하기 위해 전면적인 재구성을 수행하였다. 기존 약 17,000종 규모의 PPI 라이브러리를 Bemis-Murcko 코어 구조 분석한 결과 총 15,000개의 고유 코어를 보유하고 있어 구조적 다양성이 매우 높았지만, PPI 저해제의 물성 경향(Rule-of-4 등)을 만족하지 못해 물성 기반 정제 과정을 수행하여 재선별하였다. 이를 통해 약 2,700종 규모의 핵심 PPI 라이브러리로 재정비하였다.

이번 재구성을 통해 마련된 PPI 라이브러리는 구조적 scaffold 정보와 기능적 상호작용 특성이 통합된 형태로 구성되어, PPI 표적 기반 가상 스크리닝, 구조 기반 설계(SBDD), hit 확장 연구에서 보다 실질적인 출발점으로 활용될 것으로 기대된다.

[그림] PPI 라이브러리 재구성 : PCA 기반 화학공간 및 물성 분포 검증



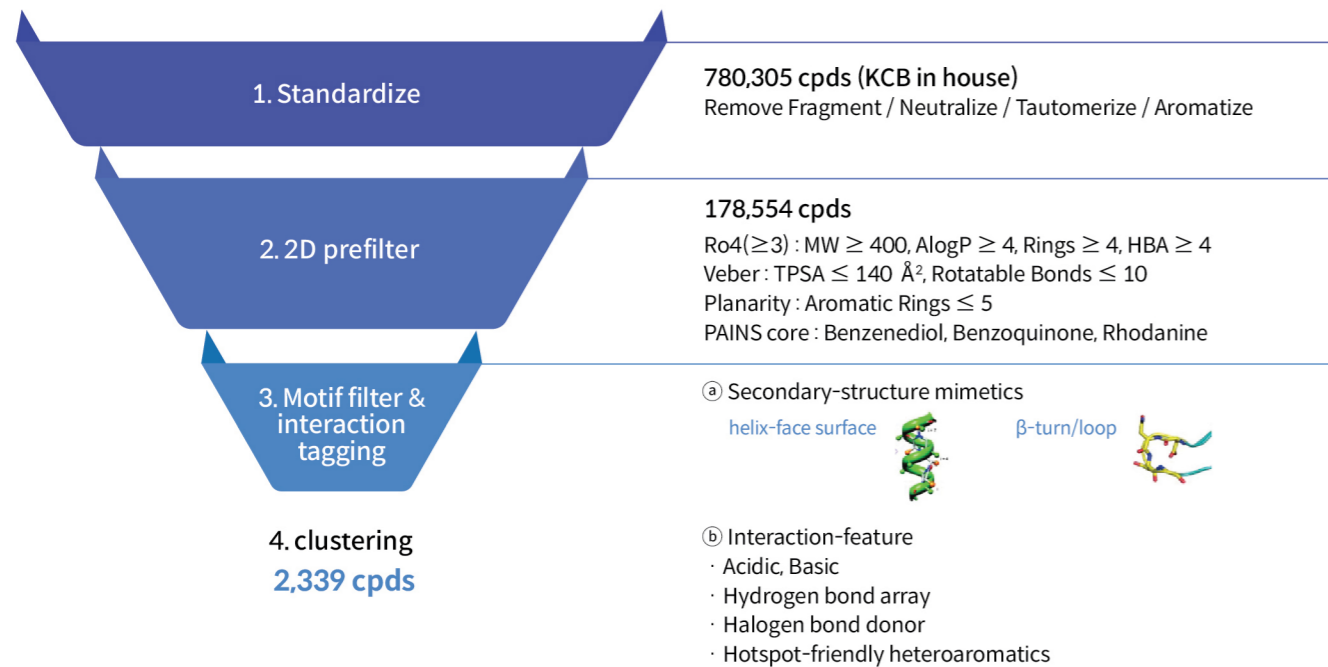
### 모티프(Motif) 기반 PPI 라이브러리 신규 구성

Peptidomimetics는 펩타이드가 갖는 결합 모드와 핵심 상호작용을 구조적으로 모사하면서도, 펩타이드의 단점인 낮은 안정성 및 생체이용률을 개선한 저분자 또는 준저분자 화합물로 정의된다. 최근 연구에서는  $\alpha$ -helix,  $\beta$ -turn,  $\beta$ -strand 등 PPI에서 빈번히 관여하는 2차 구조를 모사한 peptidomimetic 화합물이 다양한 PPI 및 효소 표적에서 유의미한 활성을 보이고 있음이 보고되고 있다. 특히 PD-1/PD-L1, MLL1-WDR5, Bcl-2 계열과 같은 PPI 표적뿐 아니라, SARS-CoV-2 메인 프로테아제 억제제 *nirmatrelvir*와 같은 실제 승인 약물 사례를 통해 peptidomimetic 설계 전략의 실질적 가능성이 입증되고 있다.<sup>[1],[2]</sup>

이러한 연구 흐름을 반영하여 한국화학물은행은 보유 중인 약 78만 종의 전체 화합물을 대상으로  $\alpha$ -helix face mimetic 계열(oligoamide, oligobenzamide, oligopyridylamide 등)과  $\beta$ -turn/loop mimetic 계열(DKP, lactam, benzodiazepine 등)의 PPI 결합 인터페이스의 핵심 구조적 요소를 효과적으로 모사할 수 있는 화합물을 분석 정제하였고 구조적 다양성을 고려하여 최종적으로 2,339종을 선별하였다. 새롭게 제작된 라이브러리는 올해 하반기부터 서비스가 진행될 예정이다.

[1] Wang, J.; Zheng, P.; Yu, J.; Yang, X.; Zhang, J. Rational design of small-sized peptidomimetic inhibitors disrupting protein-protein interaction. *RSC Medicinal Chemistry*, **2024**, *15*, 2212–2225.

[2] Owen, D. R. et al. An oral SARS-CoV-2 Mpro inhibitor for the treatment of COVID-19. *Science*, **2021**, *374*, 1586–1593.

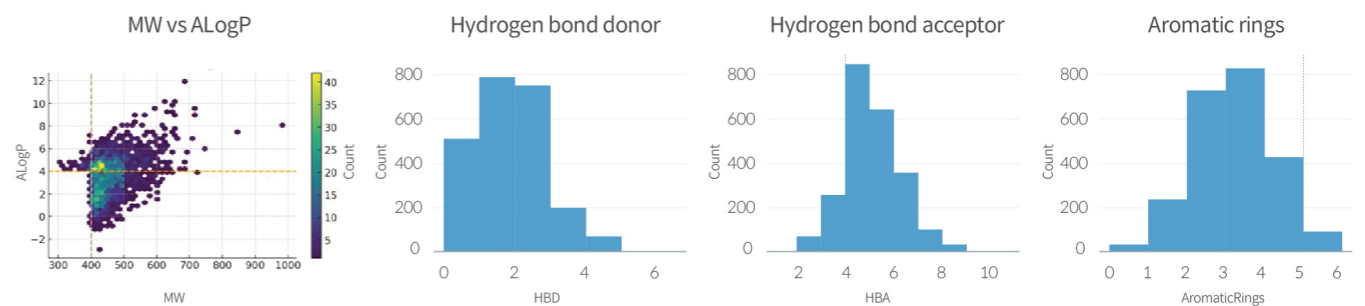


1. Standardization : 화합물 구조를 분석 가능한 형태로 정리
2. 2D Prefiltering : 약물화 가능성이 높은 화합물 선별
3. Motif & interaction filter : PPI 결합에 유리한 구조와 특성 선별
4. Clustering : 서로 다른 구조를 고르게 구성

### PPI 라이브러리 구성

	PPI Category	Scaffold Tag	화합물 수	
Secondary-structure mimetics	Helix-face surface	Oligoamide	625	
		Oligopyridylamide	26	
		Oligobenzamide	180	
		Oligoester	14	
		Indane	426	
		Pyrrolopyrimidine	32	
		Oligourea	316	
		$\beta$ -turn/loop	Diketopiperazine	173
			Lactam	261
			Benzodiazepine	23
tPDCA	10			
Oxindole	170			
Hydantoin	70			
Oxazolidinone	236			
Interaction-feature	Acidic		38	
	Basic	649		
	HbondArray	550		
	Xbond Donor	596		
	HeteroAromatic	64		
			943	

### PPI 라이브러리 화합물 물성 분포



## 화합물 분양 제도 및 운영 기준 개편 안내

한국화학물은행은 화합물 활용자의 편의성을 높이고 내부 운영의 효율성을 제고하기 위해 화합물 활용 및 관리와 관련된 규정을 단계적으로 개선하고 있다. 이번 규정 개정은 이용 절차의 명확화와 지속 가능한 화합물 관리 체계 구축을 목표로 하며, 일부 비용 체계와 운영 기준을 현실화하는 내용을 포함하고 있다.

### 화합물 납부 절차 및 분양 비용 변경 안내

한국화학물은행은 화합물 분양 과정에서 연구 현장의 행정적 부담을 줄이고, 보다 원활한 분양 서비스를 제공하기 위해 2026년 4월부터 화합물 분양 실비 선불제를 도입하고 분양 실비를 조정하였다.

그동안 화합물 분양 이후 실비를 청구하는 방식은 택배비의 별도 처리, 개인 경비 정산 등 활용자 측에서 행정적으로 번거로운 절차가 수반되는 경우가 많았다. 이러한 현장 의견을 반영하여, 분양 비용 납부 절차를 보다 단순하고 명확하게 개선할 필요성이 제기되어 왔다.

이에 따라 2026년 4월부터 화합물 분양 요청 시점에 분양 실비를 사전에 납부하는 방식으로 절차를 변경하고, 납부 확인 후 화합물 준비 및 배송이 진행되고 있다. 또한 화합물 발송 시 발생하는 기타수수료(택배비용)를 분양 실비 항목에 포함하여 일괄 청구함으로써, 이용자의 비용 정산 부담을 줄이고 분양 절차 전반의 편의성을 높였다.

한편, 화합물 분양 실비 조정도 함께 시행된다. 이는 실험 소모품 단가의 지속적인 상승, 화합물 준비 및 분양 과정에서 발생하는 간접 비용 증가 등에 따른 조치다. 분양 실비는 96-well plate 기준 30,400원에서 38,600원, 384-well plate 기준 117,100원에서 148,900원으로 조정되었다. 다만, 중소기업, 벤처기업, 대학 및 연구소 이용자를 대상으로 한 분양 실비 50% 감면 정책은 기존과 동일하게 유지되어, 연구 현장의 부담을 최소화하였다.

한국화학물은행은 이번 제도 개편을 통해 보다 안정적이고 효율적인 화합물 분양 서비스를 제공함으로써, 연구자들이 연구 본연에 집중할 수 있는 환경을 지속적으로 조성해 나갈 방침이다.

(부가세 별도) 분양 비용(2026년 4월 이후)

Plate종류	단가	대기업 / 중견기업	중소기업/벤처/대학교/공공연구기관	기타 수수료(택배비용)
96-well (80종 / 1 plate)	38,600	38,600	19,300	5,000
384-well (320종 / 1 plate)	148,900	148,900	74,450	

### KCB 화합물 분양 프로세스 전환 : 후불제에서 선불제로



### 장기 비공개 화합물 보관 수수료 도입

한국화학물은행은 기탁 화합물 중 장기간 비공개 상태로 보관되는 화합물의 효율적인 관리와 공공 활용 촉진을 위해 장기 비공개 화합물 보관 수수료 부과 제도 도입을 결정하고, 관련 운영규정을 개정하여 2027년 시행을 목표로 준비하고 있다.

한국화학물은행은 화합물의 체계적인 관리와 분양을 담당하는 공공기관으로서, 한정된 보관 공간과 관리 자원을 효율적으로 운영할 필요가 있다. 그러나 장기간 활용되지 않은 채 비공개 상태로 유지되는 화합물이 지속적으로 증가하면서, 보관 시설의 수용 한계에 근접하고 관리 부담이 점차 확대되고 있다. 특히 장기 보관 화합물은 정기적인 품질 관리와 재고 유지가 요구되어, 실제 활용 여부와 무관하게 지속적인 관리 자원이 투입되는 구조적 한계를 안고 있다.

이에 따라 한국화학물은행은 화합물 관리의 책임 주체를 명확히 하고, 장기 보관에 따른 관리 비용을 합리적으로 반영하기 위한 제도 정비를 추진하였다. 그 결과, 비공개 상태로 5년 이상 장기 보관된 기탁 화합물을 공개 활용으로 전환하지 않는 경우, 해당 화합물을 기탁한 기관을 대상으로 화합물 관리에 따른 보관 수수료를 부과하기로 하였다.

본 규정은 2025년 11월 10일 개최된 KCB 운영위원회에서 심의·의결을 거쳐 확정되어 운영규정이 개정됐으며, 향후 화합물의 공개 활용을 유도하고 한국화학물은행 운영의 지속가능성을 제고하는 제도로 운영될 예정이다.

### 기탁화합물 범위 및 기준 강화 안내

한국화학물은행은 화합물의 품질 신뢰도 강화를 위해, 2026년 1월부터 기탁되는 화합물의 순도 기준을 기존 80% 이상에서 90% 이상으로 상향 조정하였다.

이번 기준 조정은 분석 장비의 측정 불확도와 오차 범위를 고려하고, 장기 보관 과정에서 발생할 수 있는 환경적 요인에 따른 품질 변화를 감안하여, 반복 활용이 가능한 연구자원의 안정성을 확보하기 위한 조치다. 아울러 보관 시설 및 장비의 관리 한계 내에서 합리적으로 유지·검증 가능한 품질 기준을 설정하기 위한 목적을 포함하고 있다.

한국화학물은행은 이번 기준 강화를 통해 화합물 기반 연구에서 발생할 수 있는 불확실성을 줄이고, 보다 신뢰도 높은 연구 환경을 제공하고자 한다.

## 연구데이터 활용 AI 기반 신약개발 경진대회 운영 성과

한국화학물은행은 합성 화합물 연구데이터의 활용 가치를 확산하고 인공지능 기반 신약개발 연구의 저변을 확대하기 위해 신약개발 AI 경진대회를 지속적으로 추진해오고 있다. 전국 누구나 참여할 수 있는 개방형 경진대회를 통해 연구자와 일반 국민의 참여를 유도하고, 실제 실험 데이터를 기반으로 한 AI 모델 개발을 통해 데이터 기반 신약개발 연구 생태계 조성에 기여하고 있다. 이러한 노력은 경진대회 성과의 학술 논문 게재와 한국화학물은행 통합데이터플랫폼에 수상 AI모델을 탑재한 서비스 개시로 이어지는 등 실질적인 연구 성과 창출로도 확장되고 있다.

### 「Boost up AI 2025」 신약개발 AI 경진대회 개최

한국화학물은행은 신약개발 연구데이터의 활용 가치를 확산하고 인공지능 기술 적용을 촉진하기 위해 AI 경진대회 「Boost up AI 2025」를 개최하였다. 2025년 6월 23일부터 7월 31일까지 진행된 본 대회에는 신약개발과 인공지능에 관심 있는 전국민을 대상으로 총 1,268명(1,128팀)이 참여하였다. 경진대회는 한국화학연구원과 한국생명공학연구원이 공동 주최하고, 한국화학물은행과 KOBIC이 주관하였으며, 과학기술정보통신부의 후원으로 추진되었다.

이번 경진대회의 주제는 ‘CYP3A4(Cytochrome P450 3A4)\* 효소 저해 예측 모델 개발’로, 약물 상호작용 및 대사 안정성 예측에 중요한 데이터를 활용한 AI 기반 예측모델 구축에 초점을 맞추었다. 대회 참가자들은 한국화학물은행이 보유한 CYP3A4 효소 저해 실험 데이터 1,681건을 AI 트레이닝 셋으로 활용하였다. 해당 데이터는 10 μM 농도에서의 저해율(% inhibition)을 기준으로 측정된 결과로, 총 2,000건의 실험 데이터 중 품질 검증을 거쳐 선별된 유효 데이터이다.

\* CYP3A4는 인체 내 약물 대사에 중요한 역할을 수행하는 Cytochrome P450 계열 효소로, 신약 후보 물질의 초기 스크리닝 단계에서 안전성과 유효성을 평가하는 주요 지표로 활용되고 있다.

치열한 경쟁 끝에 최우수상은 ‘팔미리(서울대학교)’팀, 우수상은 ‘언어킬러(동국대학교), Gratus907((주)스탠다임)’팀, 장려상은 ‘비비곰탕(소속없음), fotavgg(광주과기원)’팀이 각각 선정되었다. 시상식은 2025년 12월 19일 대전컨벤션센터에서 개최된 제 4회 다부처 생명연구자원 성과교류회에서 진행되었다.



「Boost up AI 2025」 신약개발 AI 경진대회 대상 수상자 / 신약개발 AI 경진대회 포스터

### 2023 신약개발 AI 경진대회 성과 논문 게재 및 AI 기반 예측 서비스 도입

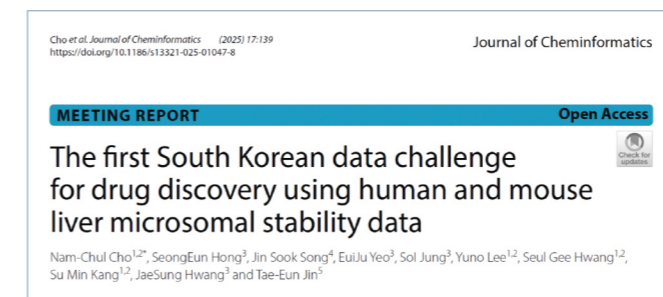
한국화학물은행이 구축한 사람 및 마우스 간 미소체(microsome) 대사안정성 데이터를 활용한 국내 최초의 신약개발 AI 경진대회 ‘JUMP AI 2023’의 성과가 국제 학술지 *Journal of Cheminformatics*에 게재되었다.

이 논문은 2023년 진행된 신약개발 AI 경진대회(JUMP AI 2023)를 종합 정리한 미팅 리포트로, 대회 기획 배경부터 데이터 구성, 평가 방식, 수상팀의 AI 모델링 전략까지를 담아 실제 연구데이터 기반 AI 신약개발의 가능성을 국제적으로 입증한 사례이다.

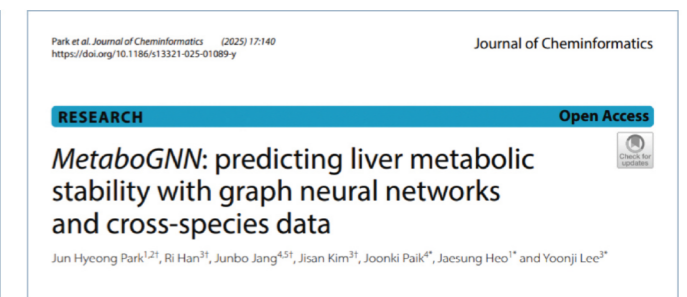
아울러 한국화학물은행은 JUMP AI 2023 수상작의 AI 기술을 기반으로, 간 대사안정성 예측을 지원하는 AI 서비스를 새롭게 도입하였다. 해당 서비스는 수상팀이 개발한 MetaboGNN 모델을 기반으로 구축되었으며, Graph Neural Network(GNN)를 활용해 분자 구조의 그래프 표현과 대사안정성 데이터를 학습한 인공지능 모델이다. 사용자는 화합물의 SMILES 정보를 입력하면, human liver microsomes(HLM) 및 mouse liver microsomes(MLM)에 대한 대사안정성 예측결과를 확인할 수 있다.

MetaboGNN은 JUMP AI 2023 수상작으로서, 경진대회 성과가 단순한 연구 결과에 그치지 않고 실제 연구 지원 서비스로 확장된 사례라는 점에서 의미가 크다. 국내에서 생산된 신뢰도 높은 실험 데이터를 개방하고, 이를 AI 경진대회 및 서비스로 연계한 첫 사례로, 신약개발 분야에서 소재-데이터-인공지능을 연결하는 공공 연구 인프라의 확장 가능성을 보여준다.

관련 모델 및 연구 내용은 GitHub(<https://github.com/qwon135/MetaboGNN>)와 *Journal of Cheminformatics* (2025, Volume 17, Article 140)를 통해 확인할 수 있다.



JUMP AI 2023 AI 경진대회 성과 국제학술지 게재



AI 경진대회 수상 모델 MetaboGNN의 설계 및 모델링 전략 논문

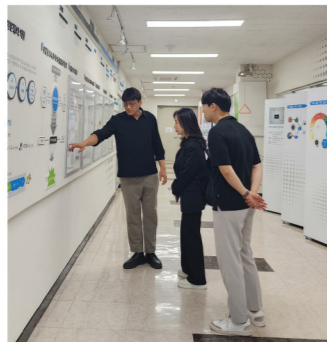
## 주요 방문 인사 및 교류 현황

(2025년 하반기)

방문일자	방문기관	방문일자	방문기관
2025.07.22	청소년 연구현장투어	2025.11.12	한국과학기술원 이소현 교수 외 1인
2025.07.23	연세의료원 이기쁨 교수	2025.11.20	K-MEDI hub 홍은미 책임연구원
2025.07.24	Salisbury University 강광욱 교수	2025.11.28	노보메디슨 이명세 공동대표, 안구현 연구소장
2025.08.22	한국한의학연구원 박기선 박사	2025.12.08	성균관대 이승연학생 외 1인
2025.09.09	초등학교 교사 10여명	2025.12.10	한국연구재단 정길생 신약단장
2025.09.17	벨기에 부총리 외 9인	2025.12.12	G-VIC 현장컨설팅



청소년 연구현장투어



연세의료원 이기쁨 교수



Salisbury University 강광욱 교수



한국한의학연구원 박기선 박사



초등학교 교사 10여명



벨기에 부총리 외 9인



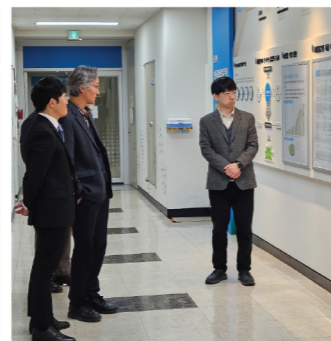
한국과학기술원 이소현 교수 외 1인



노보메디슨 이명세 공동대표, 안구현 연구소장



성균관대 이승연학생 외 1인



한국연구재단 정길생 신약단장



G-VIC 현장컨설팅

## 화학물 보유 현황

한국화학물은행(KCB)은 2025년 12월 31일 기준 78만종 이상의 화학물을 보유하고 있으며 다양성, 약물성, 독창성이 우수한 고수준 신약 소재 화학물 라이브러리를 제공하기 위하여 다양한 방법으로 우수한 화학물을 확보하고 있다.

### 1 연구성과 기탁

「국가연구개발사업 등의 성과평가 및 성과관리에 관한 법률」 제26조 및 「국가연구개발혁신법」 시행령 제33조 3항에 따라 국가연구개발 사업 수행을 통해 창출된 연구성과(화학물)는 연구성과 관리·유통 전담기관인 한국화학연구원 한국화학물은행에 등록·기탁하도록 되어 있다.

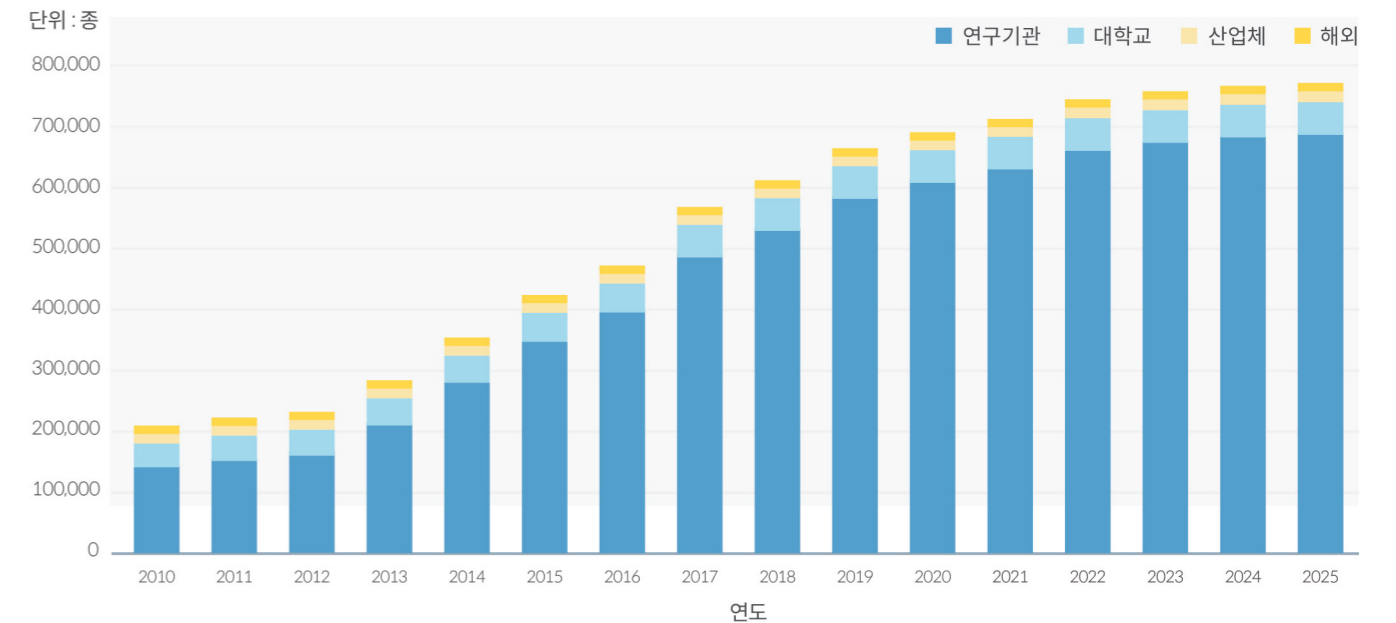
### 2 국내 전문가 공모 위탁합성

보유화학물의 구조 다양성 확대를 위하여 국내 합성 전문가를 대상으로 위탁합성 과제를 공모, 선정을 통하여 화학물을 확보하고 있다. 2014년부터 매년 15개 내외의 전문가 위탁합성 과제를 선정하고, 이를 통해 2025년까지 누적 21,800여종을 확보하였다. 2026년에도 12개 과제를 선정하여 1,000여종의 화학물을 확보할 예정이다.

### 3 특수 골격 화학물 해외 구매

단순 기탁만으로 충족하기 어려운 화학물 다양성을 신속하게 확보하기 위하여 화학정보학 및 분자모델링 기술을 활용하여 약물성 및 다양성 극대화를 고려한 특수 골격 화학물을 해외 vendor로부터 선별하여 구매, 확보하고 있다. 2026년에도 가치가 높은 라이브러리를 지속적으로 확보하여 연구자들에게 제공할 예정이다.

### 화학물 확보 연도별 누계 현황(2010~2025) : 78만종 보유



## 화합물 정보 제공 및 활용

한국화학물은행(KCB)은 보유 화합물 및 관련 데이터의 체계적인 개방과 활용 확대를 통해 연구자 지원을 지속적으로 수행하고 있다. 공개 가능한 화합물 구조 정보와 약효시험 데이터를 중심으로 정보 제공 서비스를 운영하고 있으며, 임상화합물, 천연물 정보뿐 아니라 세포독성 및 대사안정성 등 자체 생산 데이터(KCB 생산데이터)도 함께 제공하여 화합물 기반 연구의 활용도를 높이고 있다.

### 정보 제공 현황(2025년)

(단위 : 회, 개)

정보 종류	산업체		대학교		연구기관		계	
	제공	화합물	제공	화합물	제공	화합물	제공	화합물
임상화합물 정보	19	303	21	3,974	8	164	48	4,441
천연물 정보	11	57	14	1,981	4	20	29	2,058
세포독성(KCB 생산 데이터)	15	76	14	59	5	39	34	174
대사안정성(KCB 생산 데이터)	14	75	12	56	5	37	31	168

### 최근 5년간 화합물 활용 현황

최근 5년간 한국화학물은행의 화합물은 170건 이상의 연구과제에 활용되고 300회 이상의 화합물 분양이 이루어지며 국내 신약개발 연구를 꾸준히 지원하고 있다. 특히 신규 연구과제를 중심으로 지속적인 활용 수요가 이어지며 화합물은행 자원의 활용도가 안정적으로 유지되고 있다.

연도	활용과제(건)		화합물 분양(회)		분양 화합물(점)	
	전체과제	신규과제	전체과제	신규과제	전체과제	신규과제
2021	213	116	387	238	491,985	340,996
2022	246	126	442	244	1,000,752	245,653
2023	197	95	403	181	493,064	240,540
2024	186	111	319	188	267,383	212,826
2025	177	84	313	135	446,133	190,048

## 연구 성과 및 확산 - 한국화학물은행 활용 논문(2025년)

### 활용 논문(2025년 하반기 14건)

한국화학물은행 제공 라이브러리를 활용하여 발표된 논문 목록

No	논문명	저자	지널
1	Exploring materials data through collaboration : 2024 KRICT ChemDX Hackathon	Su-Hyun Yoo, Andre K. Y. Low, Jose Recatala-Gomez, Harikrishna Sahu, Chiho Kim, Joonyoung F. Joung, Hoje Chun, Katerina A. Christofidou, Joshua Berry, Michail Minotakis, Kisung Kang, Kwang-soo Kim, Gaheun Shin, Hyunwoo Jang, Sanghyuk Lee, Minkyu Park, Byung-Hyun Kim, Kihyun Shin, Junggho Shin, Aloysius Soon, Joshua Schrier*, Woosun Jang*	<i>Journal of Materials Informatics</i> 2025, 5, 54
2	Discovery of a Potent Tat-Binding Antiretroviral Compound Using a Two-Step Screening Approach	YoungHyun Shin, Yujin Jung, Dong-Eun Kim, Jihwan Gim, Songmee Bae, Cheol-Hee Yoon,* Chul Min Park,* and Hong Gi Kim*	<i>Biochemistry</i> 2025, 64(24), 4692-4705
3	NanoBRET-Based Biosensor for High-Throughput Screening of RAB11A-FIP2 Interaction Inhibitors	Gaeun Yoo, Hyunkoo Kang, Haksoo Lee, Byeongsoo Kim, HyeSook Youn, and BuHyun Youn*	<i>Analytical Chemistry</i> 2025, online
4	Collagen I is the effective therapeutic target for treating desmoid tumors	Yehyeong Lee, Yonghyo Kim, Chankyoung Lee, Tae Il Kim, Yong-Hee Cho	<i>Anti-Cancer Drugs</i> 2025, online
5	Discovery of (4-Phenyl-cyclohexyl)acetate-Derived Tyrosylprotein Sulfotransferase 2 (TPST2) Inhibitors with Potent Anti-Tumor Activity for Immuno-Oncology Applications	Soo Bin Park, Hyun Kim, Yumi Oh, Minwoo Jin, Myeonggil Jeon, Yunjae Kim, Taein Park, Jihyun Kim, Beomki Cho, Chaemin Noh, Jihyeok Cho, Je-Heon Lee, Chanyeong Jeong, Ji-Woo Mok, Soo Hyun Eom, Sung-Yup Cho, Hansoo Park,* and Yong-Chul Kim*	<i>Journal of Medicinal Chemistry</i> 2025, 68(21), 22401-22427
6	Biofilm Formation by Rice Rhizosphere Nitrogen-Fixing Microorganisms and Its Effect on Rice Growth Promotion	Jae-Hyeon Oh *, Eunhee Kim and Mihyun Cho	<i>Biology</i> 2025, 14(9), 1249
7	Apomorphine is a novel necroptosis inhibitor targeting mixed lineage kinase domain-like protein oligomerization	Myeonggil Han, Dong-Hyun Seo, Man Sup Kwak, In Ho Park, Woo Joong Rhee, Hee Sue Kim, Eunkyeong Jeon, Je-Jung Lee, Cheol Ho Park, Nam Doo Kim, Taebo Sim, You-Sun Kim, Kyoung-Seok Ryu* & Jeon-Soo Shin*	<i>Cell Death Discovery</i> 2025, 11:457

No	논문명	저자	저널
8	Tizoxanide associated with anti-virulent activity controls fire blight disease caused by <i>Erwinia amylovora</i> in <i>Malus asiatica</i>	Yeong Seok Kim, Eom-Jeong Kang, Dohyun Kim, Bomin Kim, Jae Woo Han, Joon-Ho Lee, Sang-Wook Han, Gyung Ja Choi & Hun Kim*	<i>Communications Biology</i> 2025, 8:1451
9	In vivo and in vitro evaluation of the protective effects of osthole against ototoxicity using the zebrafish model and HEI-OC1 cell line	Kyungtae Hyun, Yunkyoung Lee, Sumin Hong, Eunjung Han, Saemi Park, Hyun woo Baek, Hwee-Jin Kim, Yoon Chan Rah, June Choi*	<i>NeuroToxicology</i> 2025, 110, 197-208
10	The first South Korean data challenge for drug discovery using human and mouse liver microsomal stability data	Nam-Chul Cho*, SeongEun Hong, Jin Sook Song, EuiJu Yeo, Sol Jung, Yuno Lee, Seul Gee Hwang, Su Min Kang, JaeSung Hwang & Tae-Eun Jin	<i>Journal of Cheminformatics</i> 2025, 17:139
11	Cytotoxic profiling of Korea Chemical Bank diversity library	Jinhee Kim, Kwang-Eun Choi, Yuno Lee, Daeyoung Jeong, Hyun Young Kim, Jung-In Lee, Heeyeong Cho, Nam-Chul Cho*	<i>SLAS Discovery</i> 2025, 35, 100267
12	Inhibition of breast cancer resistance protein by flavonols: in vitro, in vivo, and in silico implications of the interactions	Kyeong-Ryoon Lee, Min-Ji Kang, Min Ju Kim, Yiseul Im, Hyeon-Cheol Jeong & Yoon-Jee Chae*	<i>Scientific Reports</i> 2025, 15:28558
13	Anti-Biofilm Potential of Daucoesterol against <i>Staphylococcus aureus</i>	Su-Jin Yum, Jun Hyeok Kwon, Hee Gon Jeong, Seung Min Kim	<i>Human Ecology Research</i> 2025, 63(2), 165-174
14	Development of LpxC Inhibitors Based on the Mmechanism of Action of Colistin in <i>Acinetobacter baumannii</i>	Rhoeun Lee, Jihyeon Kim, Chaeyoung Lee, Inseo Kim, Hyungjin Eoh, and Wonsik Lee*	<i>ACS Infectious Diseases</i> 2025, online



# AI 신약개발의 현황 · 전망과 전략적 접근 방안

한국제약바이오협회 AI 신약연구원 원장 표준희

## 왜 지금 AI 신약개발인가

전통적으로 신약개발은 대표적인 고위험·고비용 사업으로 꼽힌다. 기초 연구 단계에서 유망한 타깃을 찾고, 수많은 후보 화합물을 설계·합성한 뒤, 비임상과 임상 1·2·3상, 허가를 거쳐 시장에 나오기까지 통상 10~15년이라는 시간이 필요하다. 개발 과정에서 투입되는 비용은 10억 달러에서 20억 달러까지 추산되며, 전체 후보 가운데 최종적으로 허가까지 도달하는 비율은 한 자릿수에 머문다. 고령화, 만성질환의 증가 및 감염병 유행 등 신약에 대한 수요는 늘어나는데, 기존 방식의 R&D만으로는 사회가 요구하는 속도를 따라가기 어렵다는 위기의식이 업계 전반에 퍼져있다.

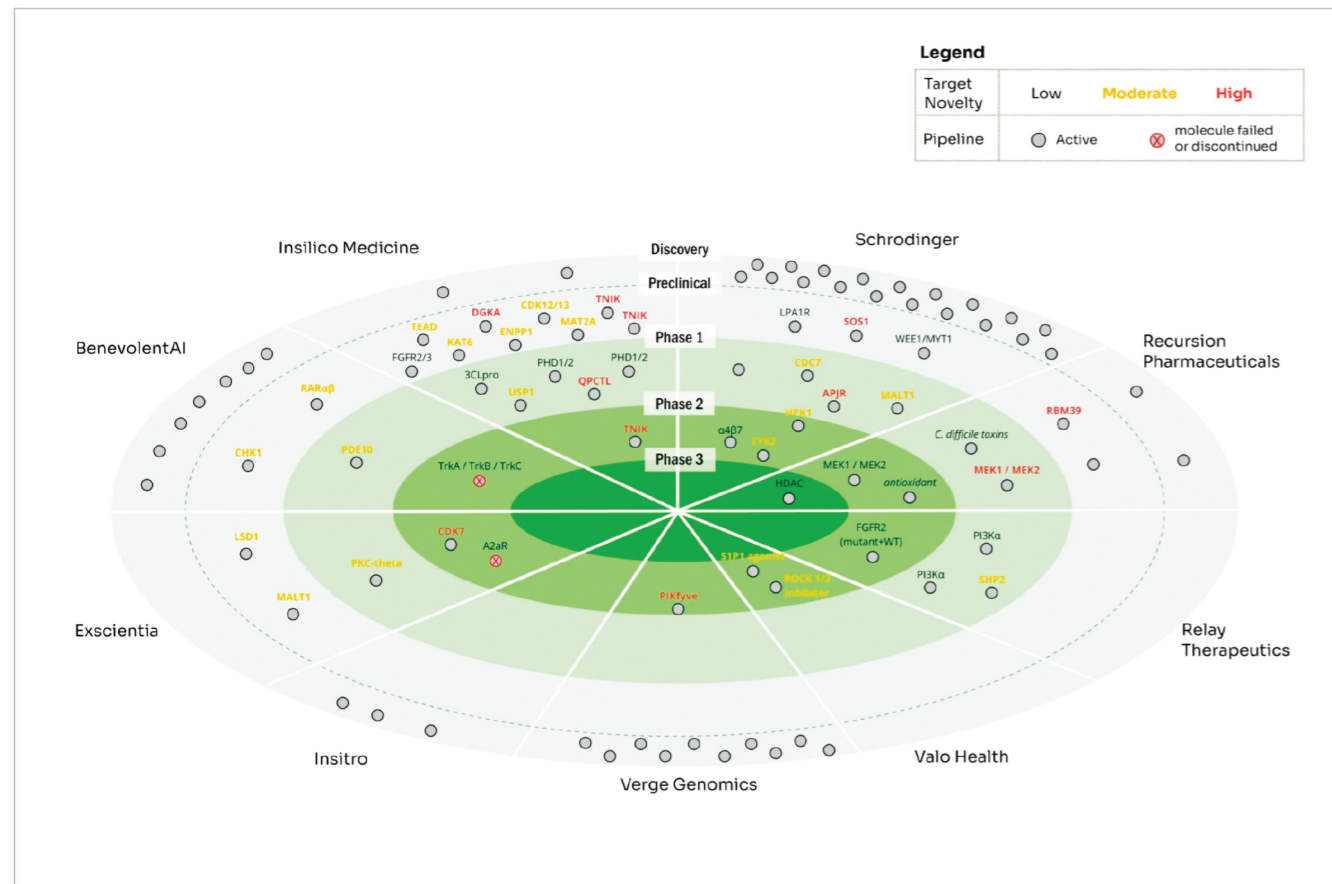
한편, 지난 10여 년 동안 생명과학 분야 데이터의 규모와 복잡도는 폭발적으로 증가했다. 유전체·전사체·단백질체 등 멀티 오믹스 데이터와 대규모 화합물 라이브러리, 비임상·임상 데이터, 실제 진료 현장에서 생산되는 실사용 데이터(Real World Data)까지, 신약개발에 활용 가능한 데이터는 그 어느 때보다 풍부하다. 그러나 이러한 데이터는 서로 다른 포맷과 품질, 편향을 지니고 있어 사람의 힘만으로 통합·해석하기에는 한계가 있다. “데이터는 많은데, 제대로 쓰지를 못한다”는 자조 섞인 목소리가 나오는 이유다.

여기서 인공지능(AI)은 신약개발의 난제를 해결할 수 있는 새로운 도구로 부상했다. 특히 딥러닝과 자연어처리 기술 등을 바탕으로, 타겟 발굴에서부터 후보 물질 설계, 유효성·독성 예측, 임상시험 설계에 이르기까지 파이프라인 전 주기 개발에 AI가 활용되고 있다. 더 나아가 변분 오토인코더(VAE), 생성적 적대신경망(GAN), 트랜스포머(Transformer), 확산모델(Diffusion Model)과 같은 생성형 AI는 새로운 분자와 단백질을 ‘디자인’하는 단계로 발전하였다.

이미 여러 AI 기반 신약 파이프라인이 실제 임상시험 단계에 진입했다는 점도 주목할 만하다. 예를 들어 생성형 AI 플랫폼을 앞세운 Insilico Medicine은 특발성 폐섬유증(IPF) 치료제 후보 ISM001-055(렌토서티브)를 타겟 발굴 단계부터 분자 설계까지 AI로 진행해 18개월 남짓한 기간에 임상 2a상에 진입시켰으며, 2024~2025년에는 긍정적인 2a상 결과와 Nature Medicine 논문 발표로 업계의 이목을 끌었다.

### The Landscape of AI-discovered Drug Candidates and Targets

The indicated data are for 2023



AI 기반 신약 파이프라인의 임상시험 현황 (출처 : PharmaTrend)

그럼에도 불구하고 아직까지 “AI가 설계한 신약”이 규제 당국의 최종 승인을 받아 시장에 출시된 사례는 없다. 일부 AI 신약개발 스타트업 기업은 기대에 비해 가시적인 성과가 부족하다는 이유로 기업가치가 급락하기도 했고, 복잡한 인간 생물학과 불완전한 데이터 환경 속에서 AI의 한계도 분명히 드러나고 있다. 그럼에도 AlphaFold를 비롯한 단백질 구조 예측 기술의 발전, 대규모 의료데이터와 고성능 컴퓨팅 자원의 확충, 규제기관의 인식 변화는 향후 10년간 AI 신약개발이 신약 R&D 패러다임을 재편할 잠재력이 크다는 점을 시사한다.

이 글에서는 먼저 전통적인 신약개발 프로세스와 그 병목을 간략히 정리한 뒤, AI·딥러닝·생성형 AI 기술의 특징을 소개하고, 신약개발 전 단계에서의 활용 사례와 대표적인 성공·실패 사례를 살펴보고자 한다. 이어서 미래 AI 신약개발 기술과 전망을 조망하고, 데이터·인력·규제 측면에서 한국이 취해야 할 전략적 방향을 제안함으로써, AI를 활용한 신약분야 R&D의 현실적 가능성과 한계를 균형 있게 논의해 보고자 한다.

### 전통적인 신약개발 과정과 병목 현상

전통적인 신약개발 과정은 크게 타겟 발굴과 검증, 유효물질(hit)·선도물질(lead) 발굴, 선도물질 최적화, 비임상 개발, 임상 1·2·3상, 허가·시판 후 감시 단계로 구분된다. 초기 연구 단계에서는 질병의 병태생리를 이해하고 약물로 개입 가능한 생물학적 타겟을 찾아내는 데 상당한 시간이 소요된다. 그 후 해당 타겟에 결합할 수 있는 후보 화합물을 고안·합성하고, 세포·동물모델에서 효능과 독성을 평가하면서 후보군을 줄이며 최적화한다. 비임상을 통과한 소수의 후보만이 임상 1·2·3상으로 진입하는데, 안전성·유효성·최적 용량·장기투여 시 부작용을 단계별로 확인해야 한다.

문제는 각 단계마다 높은 탈락률과 병목이 존재한다는 점이다. 최근 분석에 의하면, 임상시험 단계만 고려해도 개발 성공까지 소요 기간의 중앙값은 약 8.3년 수준으로, 지난 10년간 크게 개선되지 않았다. 초기 탐색 단계에서는 방대한 화합물 공간에서 극히 일부 물질만이 실제 실험으로 검증되며, 선도물질 최적화 과정에서는 활성을 개선하면 독성이 증가하거나, 용해도·투과성이 떨어지는 식의 ‘트레이드-오프(trade-off)’가 흔히 발생한다. 독성이나 약동학(ADME) 이슈로 비임상 단계에서 탈락하는 물질도 상당하며, 임상시험 단계에서도 2상·3상에서 기대했던 효과를 보여주지 못해 개발이 중단되는 사례가 빈번하다.

이러한 병목의 근본 원인은 세 가지로 요약할 수 있다. 첫째, 신약 후보가 탐색해야 하는 화학·생물학적 공간이 인간 연구자가 직관과 경험만으로 탐색하기에는 지나치게 크다는 점이다. 이론적으로 가능한 약물 구조의 수는 10<sup>60</sup>개를 넘는 것으로 추정되며, 단백질 타겟과의 상호작용, 세포·조직·전신 수준의 약동·약력학까지 고려하면 조합 공간은 사실상 무한에 가깝다. 둘째, 개발 과정에서 생성되는 데이터가 이질적이고 파편화되어 있어, 한 단계에서의 실패 경험이 다음 프로젝트에 잘 전달되지 못한다는 점이다. 셋째, 중간 특이성으로 비임상 모델(세포·동물)이 인간의 생리와 질병을 완벽히 반영하지 못해, 동물 실험에서의 성공이 임상시험에서 그대로 이어지지 않는다.

결국, 전통적인 신약개발 프로세스는 “복잡한 시스템을 제한된 데이터와 인력으로 탐색하는 거대한 시행착오 과정”에 가깝다고 볼 수 있다. 여기에 규제 요구사항의 강화, R&D 비용 상승, 특히 만료에 따른 수익 압박까지 더해지면서, 제약사는 더 빠르고 효율적인 탐색·최적화 수단을 절실히 필요로 한다. AI가 주목받는 이유는, 이러한 시행착오의 일부를 데이터 기반 예측과 탐색으로 치환함으로써 ‘낭비되는 실험’을 줄이고, 성공 확률이 높은 후보물질에 자원을 집중하도록 할 것으로 기대하기 때문이다.

## 신약개발에 활용되는 AI 기술

AI 신약개발을 이해하기 위해 복잡한 알고리즘을 모두 이해할 필요는 없다. 다만 몇 가지 핵심 개념만 짚고 넘어가면 이후 사례를 쉽게 들여다볼 수 있다. 가장 기본이 되는 것은 ‘지도학습’과 ‘비지도학습’이다. 지도학습은 입력(예: 화합물 구조, 단백질 서열)에 대해 정답(예: 효능, 독성, 결합 친화도)이 주어진 데이터를 학습하여, 새로운 입력에 대한 출력을 예측하는 방법론이다. 반면 비지도학습은 명시적 정답 없이 유사성에 근거하여 데이터의 패턴과 군집을 찾아내는데 초점을 둔다. 여기에 ‘강화학습’은 어떤 행동(예: 특정 구조를 선택·변형하는 행위)에 대한 보상(예: 예측된 약효·약물 유사성·특허 신규성)을 정의하고, 보상을 극대화하는 방향으로 정책을 학습하는 방식으로, 최근 분자 설계·실험계획 자동화에 적용되고 있다.

분자와 단백질을 AI가 이해할 수 있는 형태로 표현(representation)하는 방식 또한 중요하다. 화합물은 문자열(SMILES), 핑거프린트(Fingerprint), 그래프(원자를 노드, 결합을 엣지로 표현), 3차원 좌표 등으로 표현될 수 있으며, 단백질은 아미노산 서열(문자열)과 3차원 구조(토폴로지)로 나타낼 수 있다. 각각의 표현 방식은 다른 종류의 모델과 잘 어울린다. 예를 들어 SMILES는 자연어처리에서 사용하는 Transformer 기반 언어모델과 결합하기 좋고, 그래프 표현은 그래프 신경망(GNN)과, 3차원 구조는 3D 컨볼루션이나 SE(Spatial Encoding) 기반 모델에 활용한다.

생성형 AI는 한 단계 더 나아가 “학습한 데이터와 유사하지만 새로운 데이터”를 직접 만들어낸다. 오토인코더(AE)와 GAN은 잠재공간(latent space)에 분자를 임베딩한 뒤, 그 공간을 샘플링하여 새로운 구조를 생성하는 데 활용된다. 변분 오토인코더(VAE)는 입력 데이터를 잠재 공간의 확률 분포로 변환하며, 우리가 원하는 물성을 갖도록 확률 분포를 탐색하며 샘플링하여 신규 구조를 생성해낸다. 또한 단백질 타겟의 3차원 구조 기반의 드 노보(de novo) 디자인에 대한 연구도 활발하다. Transformer와 확산 모델은 조건부 생성(예: 특정 타겟과의 결합력, 용해도, 독성 등)까지 동시에 고려한 다목적 최적화가 가능하다는 점에서 주목받고 있다. 최근에는 이러한 생성형 모델에 강화학습을 결합하여, 실제 합성 가능성과 약물 유사성(Lipinski 규칙 등) 등을 보상으로 주어 ‘실험실에서 합성할 수 있고 약이 될 수 있는’ 후보만 생성하도록 하는 연구도 활발하다.

단백질 구조 예측 분야에서는 AlphaFold가 큰 혁신을 일으켰다. DeepMind가 공개한 AlphaFold2는 단백질의 1차 서열로부터 3차원 구조를 높은 정확도로 예측하며, X선 결정학이나 CryoEM에 의존하던 구조생물학의 패러다임을 크게 바꾸어 놓았다. 최근에는 단백질·핵산·리간드 간 복합체를 예측하는 AlphaFold3가 개발되어, 구조 기반 신약설계(SBDD)와 단백질·항체 설계까지 활용 범위가 확장되고 있다. 2024년 노벨 화학상을 Demis Hassabis와 John Jumper, David Baker에게 수여한 것은 AI 기반 단백질 구조예측이 단순한 알고리즘을 넘어 생명과학 전반에 미친 영향을 상징적으로 보여준다.

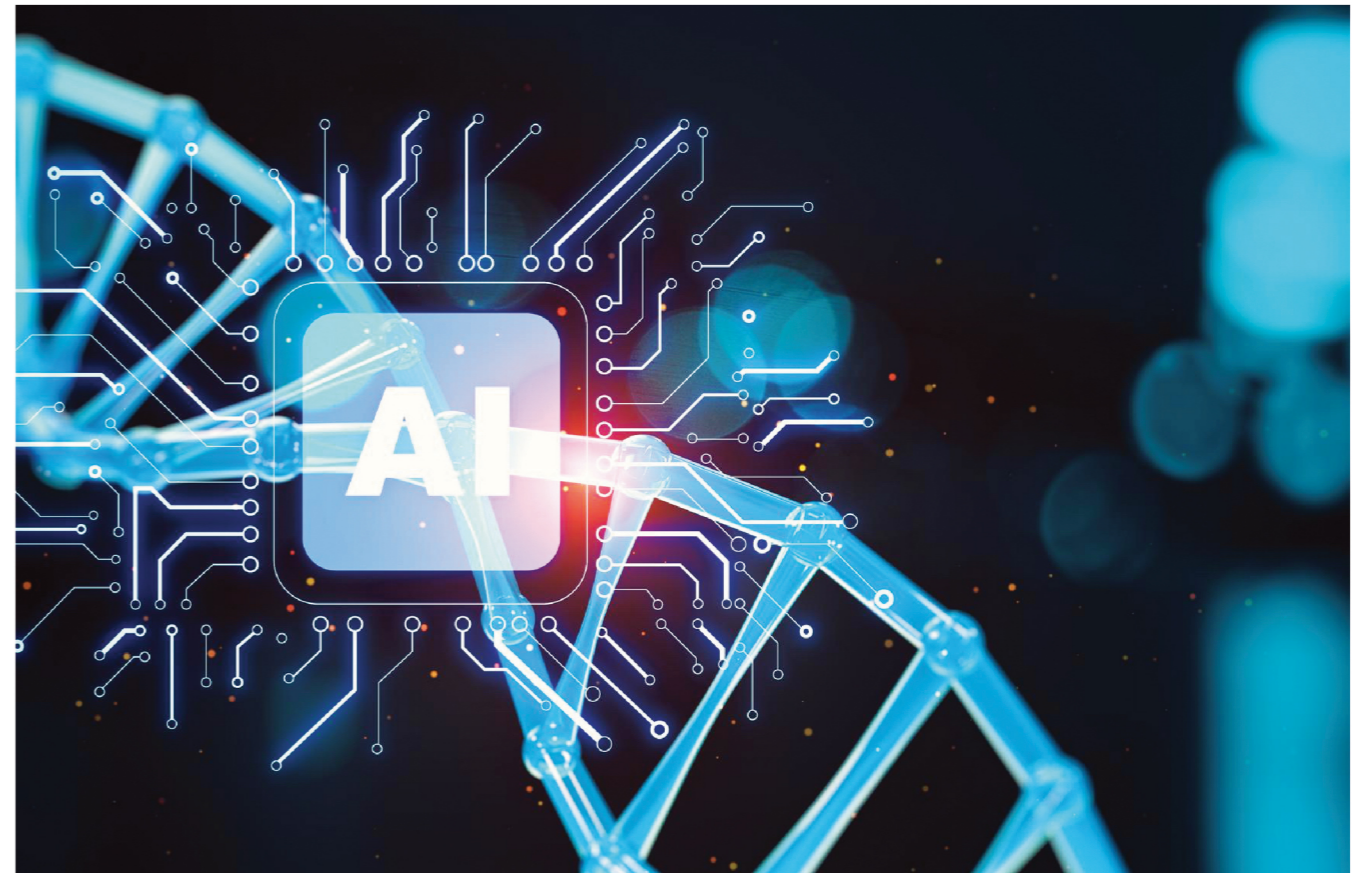
요컨대, AI 신약개발의 기술적 토대는 (1) 다양한 생물·화학 데이터를 수치화하는 표현학습, (2) 약효·독성·약동학 등을 예측하는 기계학습 모델, (3) 새로운 후보 분자·단백질을 만들어내는 생성형 모델, (4) 구조·실험·임상 설계를 최적화하는 강화학습과 최적화 알고리즘으로 나누어 볼 수 있다. 이러한 기술이 신약개발 각 단계에서 어떻게 적용되고 있는지 다음 장에서 살펴보겠다.

## 신약개발 각 단계에서의 AI 활용

### 1. 타겟 발굴과 검증

타겟 발굴 단계에서는 질병과 관련된 유전자·단백질·신호경로를 식별하고, 이 가운데 약물로 조절했을 때 임상적으로 의미 있는 효과를 낼 수 있는 ‘치료 타겟’을 찾아야 한다. 과거에는 소수의 바이오마커나 생체 경로를 중심으로 연구가 진행되었다면, 오늘날에는 유전체·전사체·단백질체·대사체 등 멀티오믹스 데이터, 대규모 환자 코호트 데이터와 지식 체계를 함께 분석하여 폭넓게 타겟 가능성을 탐색한다. AI 모델은 이러한 초고차원 데이터를 통합해 질병 네트워크를 추론하고, 질병과 강하게 연관된 유전자·단백질을 후보 타겟으로 추천한다. 해당 타겟에 대한 개입이 질병 치료와 인과성을 갖는지, 타겟으로서의 다양한 평가 지표를 분석하여 우선순위를 지원하기도 한다.

또한 AlphaFold를 비롯한 단백질 구조예측 모델은 기존에 구조 정보가 없던 타겟의 3차원 구조를 예측하여, 구조 기반 설계(SBDD)와 도킹(docking) 시뮬레이션을 가능하게 한다. 이를 통해 전통적인 고속 스크리닝으로는 접근하기 어려웠던 단백질 상호작용 표면이나, 알로스테릭(allosteric) 포켓 등도 타겟으로 연구할 수 있게 되었다. 그러나 예측 구조가 실험 구조를 완벽히 대체할 수 있는 것은 아니며, 각 단백질의 세부 특성, 동적 상태(apo/holo, 활성/비활성 상태 등)와 리간드 결합에 따른 미세한 구조 변화까지 정확히 포착하기에는 여전히 한계가 있다는 점도 함께 고려해야 한다.



## 2. 유효물질·선도물질 발굴

유효물질(hit) 발굴 단계에서 AI는 ‘가상 스크리닝’의 형태로 먼저 도입되었다. 기존에는 수십만~수백만 개의 화합물 라이브러리로 실험 스크리닝을 수행했다면, 오늘날에는 AI 모델이 미리 각 화합물이 특정 타겟에 결합할 확률, 약효, 독성을 예측해 가능성이 높은 후보만 선별하고, 실제 실험은 그 일부에 대해서만 수행하는 방식이 확산되고 있다. 그래프 신경망과 3D 구조 기반 모델 등은 분자와 단백질의 상호작용을 보다 정교하게 포착하는 데 활용되며, 일부 연구에서는 기존 방법 대비 수십 배 향상된 스크리닝 효율을 보고한 바 있다.

생성형 AI는 유효물질 발굴의 방법을 보다 근본적으로 바꾸고 있다. 기존 화합물 라이브러리에서 ‘골라 쓰는’ 것이 아니라, 원하는 물리·화학·생물학적 특성을 동시에 만족하는 새로운 분자를 설계하도록 모델을 훈련하는 것이다. 예를 들어 특정 타겟에 대한 결합 친화도는 높이되, 예측 독성은 낮고, 물에 잘 녹으며, 합성이 쉬운 분자를 생성하도록 보상을 설계할 수 있다. 또한 그동안 ‘타겟하기 어렵다고(undruggable)’ 여겨졌던 타겟에 대해서도 새로운 접근 경로를 제공할 것이라는 기대가 크다.

## 3. 선도물질(lead) 최적화

선도물질 최적화 단계는 AI가 가장 실용적으로 활용될 수 있는 영역 중 하나다. 후보 물질의 약효를 높이면서도 독성·약동학·제형 적합성을 동시에 만족시켜야 하므로, 사람 연구자의 직관과 시행착오만으로는 효율적인 의사결정이 어렵다. 이때 AI 모델은 개별 물질에 대한 ADMET(흡수·분포·대사·배설·독성) 특성을 예측하거나, 여러 목적을 동시에 고려하는 다목적 최적화(multi-objective optimization)를 수행하여 ‘파레토 최적’ 후보군을 제시할 수 있다.

최근에는 액티브 러닝(active learning)과 로봇 합성·실험 자동화가 결합된 “설계-합성-테스트-분석(Design-Make-Test-Analysis)” 페루프가 주목받고 있다. 모델이 화합물 구조와 합성 경로를 우선적으로 제안하면, 로봇 플랫폼이 이를 자동으로 합성·실험해 데이터를 신속히 축적하고, 그 결과를 다시 모델이 학습하는 순환 구조다. 이러한 페루프를 통해 선도물질 최적화에 걸리는 시간을 수년에서 수개월 수준으로 줄이겠다는 목표를 내세우는 플랫폼 개발이 늘고 있으며, 실제로 특정 회사는 저분자 화합물 최적화 시간을 평균 4.5년에서 1.5년 수준으로 단축했다고 보고하였다.

## 4. 비임상 : 독성·유효성 예측과 동물실험 대체

비임상 단계에서는 독성·유효성 평가가 핵심이다. 기존에는 설치류·비설치류를 이용한 반복투여 독성시험 등 동물실험에 크게 의존했으나, 시간과 비용, 동물복지 측면에서 한계가 있다. 대규모 독성 데이터베이스와 in vitro 시험 결과를 학습해, 특정 구조나 물질이 간독성·심독성·유전독성 등을 유발할 가능성을 사전에 예측하는 데 AI 모델이 활용된다. 미국 FDA를 비롯한 규제기관이 동물실험을 줄이고 인체 기반의 대체 시험법(NAMs)을 확대하겠다는 방향을 제시하면서, AI 기반 독성 예측과 in silico 시뮬레이션은 비임상 전략의 중요한 축으로 부상하고 있다.

실제 최근 보도에 의하면, 일부 제약사와 CRO는 AI를 활용해 약물 흡수·분포·대사·배설과 잠재 독성을 예측함으로써, 동물실험 횟수와 시간을 줄이면서도 안전성을 검증하는 중이다. 완전한 동물실험 대체까지는 시간이 걸리겠지만, AI 모델과 장기 배양 세포·생체모사칩(organ-on-chip) 기술을 조합한 하이브리드 접근법은 비임상 검증의 효율을 높이고 윤리적 부담을 줄이는 현실적인 대안으로 떠오르고 있다.

## 5. 임상 개발 : 임상시험 설계와 환자 선별

임상 개발 단계에서는 적절한 환자군을 모집하고, 통계적 검증력이 충분한 임상시험을 설계하는 것이 성공의 관건이다. AI는 전자의무기록(EHR), 오믹스 데이터, 생체 신호 데이터 등 실사용 데이터를 분석하여, 개별 환자의 약물 반응성을 예측하고, 프로토콜을 강화하며, 보다 정밀한 임상시험 선정·제외 기준을 제시하는 데 활용되고 있다. 또한 과거 임상시험 데이터를 학습한 모델은 예상 이벤트 발생율을 정교하게 추정하여, 필요한 표본 수를 줄이거나 적응형(adaptive) 임상시험 설계에 활용한다.

피험자 모집 효율화 또한 AI가 활발히 적용되는 영역이다. 자연어처리와 대형언어모델(LLM)을 활용한 피험자-임상시험 매칭 시스템은 복잡한 임상시험 프로토콜과 환자 기록을 자동으로 비교하여, 적합한 피험자 후보를 빠르게 찾아내는 데 사용된다. 실제로 전자의무기록 기반 LLM 파이프라인이 복잡한 기준을 가진 임상시험에 대해 90% 안팎의 정확도로 환자 적합성을 평가하고, 수작업 검토에 비해 소요 시간을 80% 이상 줄였다는 보고도 있다. 이러한 도구는 특히 암·희귀질환처럼 환자 수가 적고 선정·제외 기준이 복잡한 적응증에서 유용하다.

하지만 AI가 임상시험 설계를 전부 대신할 수 있는 것은 아니다. 데이터 편향과 설명가능성 부족, 규제기관의 검토 기준 부재 등으로 인해, 현재로서는 ‘인간 연구자의 의사결정을 보조하는 도구’ 수준에서 활용되는 경우가 대부분이다. 그럼에도 불구하고 임상시험 설계·운영 비용이 전체 개발비의 높은 비율을 차지한다는 점을 고려하면, AI가 이 영역에서 가져올 잠재적 효율성은 적지 않다.

## 6. 약물 재창출과 포트폴리오 최적화

약물 재창출(drug repurposing)은 기존에 개발된 약물을 새로운 적응증에 활용하는 전략으로, 상대적으로 개발 시간과 비용이 적게 든다는 장점이 있다. AI는 네트워크 약리학, 지식 그래프, 문헌·특허 텍스트 마이닝 등을 통해 약물-타겟-질병 간 숨겨진 연관성을 탐색하고, 재창출 가능성이 높은 조합을 추천하는 데 활용되고 있다. 코로나19 팬데믹 당시 다양한 AI 기반 재창출 후보 약물 리스트가 제안된 사례는, 이러한 접근의 가능성을 보여준다.

포트폴리오 수준에서는, 각 파이프라인의 기술·임상·사업적 리스크를 정량화하고, 제한된 R&D 자원을 어디에 배분해야 할지 시뮬레이션 도구로 AI를 활용한다. 개별 프로젝트의 성공 확률과 예상 매출, 특허 만료 시점, 경쟁환경 등을 모델링하면, 어떤 적응증·타겟에 집중해야 할지 객관적인 의사결정이 가능해진다. 아직은 이 영역의 성숙도가 높지는 않지만, 장기적으로는 “AI 기반 R&D 포트폴리오 관리”가 제약사의 역량 중 하나가 될 가능성이 높다.

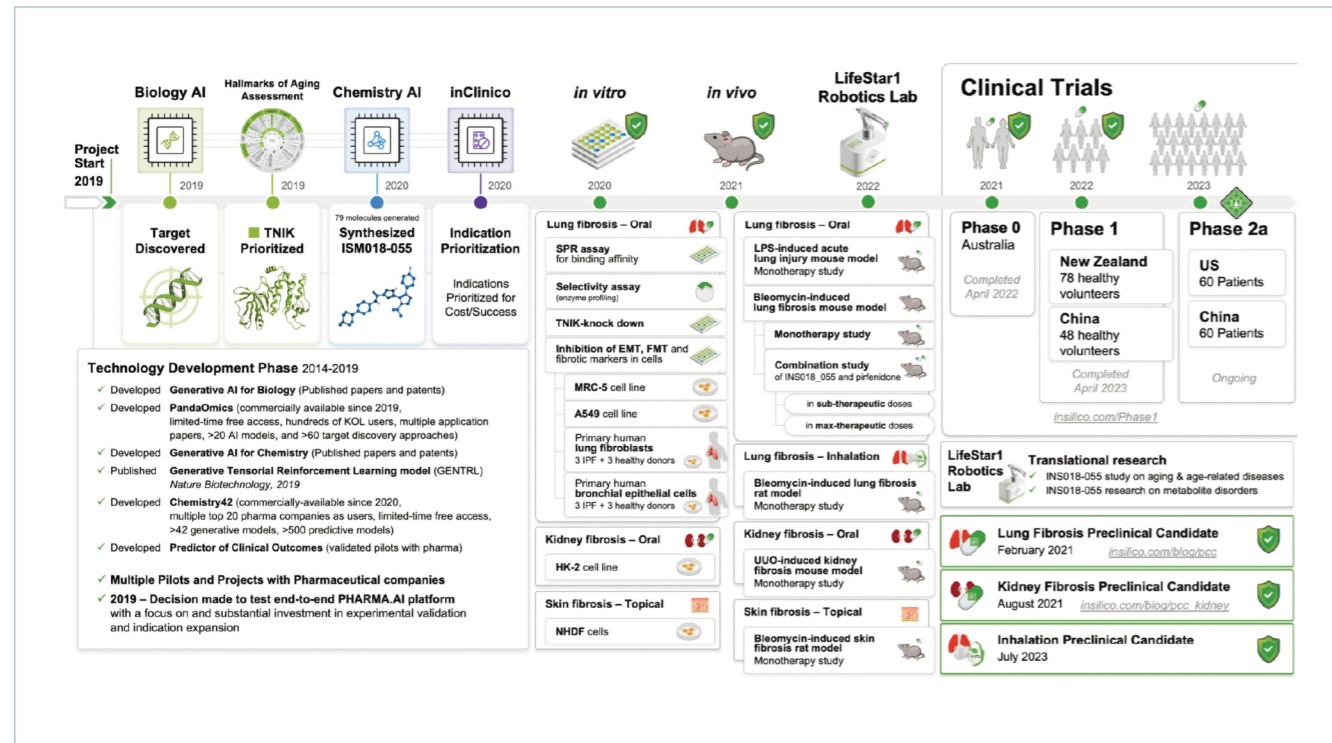
## 대표 사례 연구

### 1. Insilico Medicine과 ISM001-055 : 생성형 AI의 통합 사례

Insilico Medicine은 생성형 AI를 활용한 신약개발 플랫폼으로 잘 알려진 회사로, 타깃 발굴·바이오마커 예측·분자 설계·비임상 최적화까지 AI 플랫폼을 적극 활용하여 신약개발을 수행하는 것을 목표로 한다. 이 회사가 개발한 ISM001-055(렌토서티브)는 특발성 폐섬유증(IPF)을 적응증으로 하는 TNIK 억제제로, AI가 제안한 타깃과 분자 구조를 바탕으로 신약이 개발된 사례로 자주 언급된다.

### TNIK Discovery and Development Paper - Nature Biotechnology 2024

Documentary materials are available at [insilico.com/docuthon](https://insilico.com/docuthon)



TNIK 개발 과정 (출처 : Nature Biotechnology 2024)

기업 발표와 후속 분석에 따르면, 해당 후보물질은 AI 플랫폼 'Pharma.AI'를 통해 타깃 발굴에서 후보 선정까지 약 18개월 만에 성공했으며, 이후 비임상과 임상을 거쳐 현재 2a상까지 진행되었다. 2024~2025년 발표된 임상 2A상 중간 결과에서는 안전성이 양호하고 폐기능(FVC) 개선 등 고무적인 데이터를 보여, "AI 기반 신약개발의 첫 임상 개념증명(proof-of-concept)"이라는 평가를 받기도 했다.

이 사례의 중요성은, AI가 단일 단계에서 보조적인 역할을 하는 수준을 넘어, 질병 이해-타깃 발굴-분자 설계-비임상 설계까지 'AI-first' 파이프라인을 구성할 수 있다는 가능성을 제시했다는 데 있다. 물론 ISM001-055 역시 아직 승인까지는 검증이 더 필요하며, 후속 임상에서의 안전성·유효성, 경쟁 약물 대비 차별성이 결국 성공 여부를 결정할 것이라는 점은 잊지 말아야 한다.

### 2. Isomorphic Labs와 AlphaFold : 플랫폼 중심의 접근

Alphabet 산하 Isomorphic Labs는 AlphaFold를 비롯한 구조예측 AI를 기반으로 "AI-First end-to-end 신약설계 플랫폼"을 구축하는 데 집중하고 있다. 2025년 이 회사는 Thrive Capital 등이 주도한 6억 달러 규모의 첫 외부 투자 라운드를 완료하며, 영국 AI 기업 중 최대 수준의 투자 유치를 기록했다. 회사는 이 자금을 차세대 AI 약물설계 엔진 개발과 다중 적응증 파이프라인 확장, 인재 확보에 투입하겠다고 밝히며, 노바티스·릴리 등 다국적 제약사와 수십억 달러 규모의 마일스톤이 포함된 전략적 파트너십을 체결했다.

Isomorphic Labs는 AlphaFold3 등 첨단 구조예측 모델, 생성형 설계 엔진, 동역학과 ADMET 등을 예측하는 AI 모델을 결합한 '플랫폼'을 중심에 두고 실험으로 지속적으로 검증하는 시스템을 개발하여, 이를 통해 여러 제약사의 타깃·적응증에 맞춘 후보 물질을 생성하는 데 있다. 이는 기존 CRO형 모델과 달리, AI와 생물학을 통합한 AI First 플랫폼 기업으로 자리매김하려는 시도이기도 하다. 아직 이 회사의 파이프라인 중 어느 것도 후기 임상이나 승인 단계에 도달하지는 않았으나, 대규모 자본과 데이터·컴퓨팅을 바탕으로 장기적인 안목으로 개발하고 있다는 점에서, 향후 10년간 AI 신약개발의 방향성을 가늠할 수 있는 중요한 관찰 대상이다.

### 3. AI-Native 바이오텍의 임상 성과

최근 분석에 따르면, AI-Native 바이오텍이 개발한 초기 임상 파이프라인(주로 1상 단계)의 성공률은 전통적인 평균에 비해 상당히 높은 수준으로(80~90%) 보고되기도 한다. 이는 AI 기반 설계가 비임상 단계에서 보다 "약물다운" 후보를 골라내는 데 도움이 되었을 가능성을 시사한다. 반면 후기 임상(2·3상)과 최종 승인 단계에서는 아직 뚜렷한 우위가 관찰되지 않고 있으며, 일부 기업은 기대에 못 미치는 임상 결과와 재무적 부담으로 구조조정을 겪고 있다.

이러한 현실은 AI 신약개발이 "빠르게 돈을 버는 기술"이라기 보다는, 긴 호흡으로 R&D 과정을 재설계해야 하는 패러다임 변화임을 보여준다. 초기 임상에서의 긍정적 신호를 토대로, AI 기반 후보물질이 후기 임상과 실사용 환경(real-world)에서도 얼마나 일관된 효능과 안전성을 보이는지에 대한 데이터가 앞으로 5~10년간 밀도 있게 축적되어야 할 것이다.



## AI 신약개발의 미래 기술과 전망

AI 신약개발은 현재도 빠르게 진화하고 있지만, 향후 5~10년 사이에는 몇 가지 방향에서 질적으로 다른 단계로 도약할 가능성이 크다. 특히 파운데이션 모델(Foundation Model)과 대형언어모델(LLM), 멀티 에이전트, 멀티모달·디지털 트윈 기반 정밀의학, 자율 실험실(self-driving lab), 양자컴퓨팅과 AI의 결합 등이 핵심 축으로 거론된다.

### 1. 파운데이션 모델·LLM 기반 “통합 생명과학 엔진”

최근 컴퓨터 비전·언어 분야에서 등장한 파운데이션 모델 개념이, 생명과학·의약학 전반으로 빠르게 확산되고 있다. 2025년 발표된 논문들은 수십억~수백억 파라미터를 가진 LLM이 과학적 지식을 학습하여 질병 기전 이해, 약물 표적 예측, 화합물 설계, 심지어 임상시험 프로토콜 생성과 분석까지 신약개발 전 주기를 하나의 모델 패러다임 위에서 다룰 수 있는 가능성을 제시한다.

기존에는 “타깃 발굴용 모델, 독성 예측 모델, 텍스트 마이닝 모델”이 각각 따로 존재했다면, 앞으로는 하나의 파운데이션 모델을 미세조정(fine-tuning)하여 다양한 다운스트림 태스크(downstream task)에 적용하는 방향으로 발전 가능하다. 예를 들어, 대규모 화합물·단백질·오믹스·지식·문헌 데이터를 한꺼번에 학습한 후, 특정 질환(예: 비알코올성 지방간염, IPF)에 특화된 후보 추천이나 바이오파타믹 탐색을 위해 추가 학습만 수행하는 방식이다. 이런 모델은 데이터가 풍부한 글로벌 제약사뿐 아니라, 상대적으로 데이터가 적은 중소 바이오텍·병원 연구자도 “사전 학습된 생명과학 LLM을 빌려 쓰는” 형태로 활용할 수 있다는 점에서 파급력이 크다.

또한 이는 LLM 기반 에이전트 기술의 구현에 있어서도 중요성이 크다. 최근 등장하는 대부분의 멀티 에이전트 프레임워크에서 각 에이전트는 자체적인 LLM(또는 동일 LLM의 다른 인스턴스)을 가지고 있으며, 자연어를 통해 서로 대화·협상·검증을 수행한다. 한 에이전트는 문헌·특허 검색과 요약에 특화되고, 다른 에이전트는 코드 작성·실행, 또 다른 에이전트는 실험 설계나 결과 해석에 특화되는 방식이다. 이런 구조가 가능한 이유는 LLM이 “텍스트를 이해하고 생성하는 능력”뿐 아니라, 툴 호출(tool use), 코드 작성, 체계적인 reasoning 프롬프트에 적합한 범용 인터페이스를 제공하기 때문이다. 결국 LLM이 일종의 “공용 언어 인터프리터” 역할을 하고, 멀티 에이전트는 그 위에 얹힌 조직 구조라고 이해할 수 있다.

## 2. 멀티 에이전트 기반 자율화

멀티 에이전트(multi-agent) 기술은 하나의 거대 모델이 모든 일을 처리하는 것이 아니라, 서로 다른 역할을 가진 여러 AI 에이전트가 팀처럼 협력하도록 설계하는 패러다임이다. 신약개발에 이를 적용하면, 예를 들어 문헌·특허를 읽고 타깃 후보를 정리하는 에이전트, 분자 설계·도킹을 담당하는 에이전트, 코드를 작성해 시뮬레이션을 실행하는 에이전트, 실험계획을 짜고 로봇 실험실을 제어하는 에이전트가 하나의 파이프라인 안에서 대화하고 역할을 분담하게 된다. 실제로 최근 제안된 MADD (Multi-Agent Drug Discovery Orchestra)는 네 개의 LLM 기반 에이전트가 협업해 타깃 설명만으로 hit 발굴 파이프라인을 자동 구성·실행하고, 여러 약물 발굴 테스트에서 기존 단일 에이전트 LLM 방식보다 더 좋은 유효물질을 찾아냈다고 보고하였다.

이런 멀티 에이전트 접근은 개별 모델의 한계를 보완하면서, 실제 연구실의 “타깃 발굴 팀-화학자 팀-생물학자 팀” 구조를 디지털 공간에 투영한다는 점에서 향후 AI 신약개발 워크플로우의 기본 단위가 될 가능성이 크다.

더 나아가 멀티 에이전트 기술은 “AI 공동 연구자(co-scientist)” 개념으로 나아가, 인간 연구자와 함께 과학적 발견을 수행하는 시스템으로 진화하고 있다. Robin, SciAgents 같은 최근 개발된 시스템은 문헌 검색 에이전트·가설 생성 에이전트·데이터 분석 에이전트·실험 설계 에이전트 등을 묶어, 가설 수립→실험 계획→데이터 해석→후속 가설 제안까지 과학적 사고의 전 과정을 부분적으로 자동화했고, Robin은 이 프레임워크로 건성 황반변성(dAMD)에 대한 새로운 약물 재창출 후보(ripasudil)를 실제로 발굴하여 비임상 단계에서 실험 검증을 마쳤다.

구글이 공개한 AI co-scientist 역시 Gemini 기반 멀티 에이전트 시스템으로, 약물 재창출·타깃 발굴·내성 메커니즘 분석에 대한 연구 가설을 생성하여 이를 실제 실험실에서 검증하였다.

이러한 흐름에 일치하게 앞으로 생의학 분야에서는 단일 LLM 에이전트가 아닌 다양한 도메인 특화 도구·AI 모델·데이터를 통합하는 멀티 에이전트 워크플로우가 점차 표준이 될 것이라고 예측된다. 미래의 AI 신약개발에서는, 강력한 단일 LLM(Foundation Model)을 구축하는 것과 동시에, 이를 멀티 에이전트 구조로 오케스트레이션하여 사람·로봇·특화 도구와 협업시키는 능력이 중요한 차별화 요소가 될 가능성이 높다.

다만 복수의 에이전트가 상호작용하는 시스템은 예측 불가능성이 크기 때문에, 신약개발 전용 벤치마크를 통한 체계적인 평가와 안전장치 설계가 병행되어야 하며, 한국 제약·바이오 업계 입장에서는 이미 보유한 포인트 솔루션(AI 독성 예측, 가상 스크리닝 등)을 멀티 에이전트 오케스트레이션으로 엮어내는 전략이 비교적 빠르고 현실적인 진입 경로가 될 수 있겠다.

## 3. 멀티모달 모델과 디지털 트윈: 정밀한 가상 환자 모델

단일 데이터 타입만 보는 모델에서, 여러 모달리티를 동시에 이해하는 멀티모달 모델로의 전환도 뚜렷하다. 단백질 서열과 저분자 구조를 동시에 입력으로 받아 상호작용을 예측하는 멀티모달 Transformer(ProSmith 등), 다양한 분자 표현(SMILES, 그래프, 3D 구조)을 통합해 성질을 예측하는 모델들이 등장하고 있다. 이런 모델은 “타깃-약물-질병” 관계를 보다 입체적으로 이해하여, 보다 정확한 결합 친화도·약효·독성 예측을 가능하게 할 것으로 기대된다.

더 나아가, 디지털 트윈(digital twin) 개념이 신약개발과 임상시험 영역으로 확장되는 추세다. 최근 멀티오믹스, 약동·약력학, 임상, 환경요인 데이터를 통합해 환자별 약물 반응을 시뮬레이션하는 가상의 디지털 약리학 트윈 모델도 개발되었다.

이러한 디지털 트윈은 (1) 신규 약물 후보의 투여 시나리오를 사전에 테스트하고, (2) 임상시험에서 대조군(control arm)의 일부를 가상 환자로 대체하며, (3) 허가 후 실제 진료 환경에서의 효과·안전성을 지속적으로 모니터링하는 데 활용될 수 있다. 실제로 일부 임상시험에서는 디지털 트윈을 활용해 대조군의 일부를 대체하거나 보완하는 시도가 보고되고 있다.

장기적으로는 개별 환자 디지털 트윈에 기반한 개인 맞춤형 용량·비용요법 최적화까지 이어질 수 있다. 다만, 이러한 디지털 트윈의 신뢰성을 확보하기 위해서는 데이터 품질·표준화, 모델 검증, 규제 기준 등에서 아직 해결해야 할 과제가 많다.

#### 4. 자율 실험실(Self-driving Lab)과 AI-로봇 융합

생성형 모델과 예측 모델이 아무리 정교해도, 결국 약물은 실험실에서 합성·검증되어야 한다. 이 지점에서 자율 실험실(self-driving lab) 개념이 중요해지고 있다. 로봇 자동화 플랫폼과 AI 의사결정 엔진을 결합해, 모델이 설계한 화합물을 자동으로 합성·테스트하고, 그 결과를 다시 모델이 학습하는 “폐루프(closed-loop)” 실험 환경을 만드는 것이다.

최근 여러 국가에서 자율 실험실을 구축하였고, Atinary Lab처럼 ‘Self-Driving Labs™’를 표방하며 제약·화학 R&D 전반을 자동화하려는 시도도 진행 중이다. 이러한 시스템은 24시간 가동되며 사람보다 훨씬 빠른 속도로 설계-합성-시험-분석 사이클을 반복할 수 있어, 맥킨지 보고서에서는 AI 기반 자동화를 전면 도입하면 제약 R&D 사이클 타임을 500일 이상 줄일 수 있다는 전망을 제시하기도 했다.

전체 자율실험실을 오케스트레이션하는 소프트웨어도 등장하고 있다. 최근 다양한 기업에서 복수의 작업을 수행하기 위해 자율 실험실의 장비·AI 모델 등을 통합적으로 스케줄링하는 랩 운영체제(lab OS)를 개발하였다. 이러한 흐름은 장기적으로 “AI-로봇 융합 R&D 연구소”라는 새로운 산업 구조를 만들어낼 가능성이 있다.

#### 5. 양자컴퓨팅과 AI의 결합: 아직은 초기이지만, 긴 호흡의 게임

양자컴퓨팅은 아직 실용화 초기 단계이지만, 양자화학 계산과 분자 시뮬레이션에서 기존 슈퍼컴퓨터가 풀기 어려운 문제를 해결할 잠재력이 크다고 평가된다. 2024~2025년 발표된 리뷰 논문들은 양자머신러닝(QML)과 게이트 기반 양자신경망을 활용해, 약물-타겟 결합, 반응 경로, 약동학 등 복잡한 양자계 계산을 가속하는 가능성을 정리하고 있다.

현재는 하이브리드 양자-고전(quantum-classical) 파이프라인이 현실적인 접근이다. 실제 연구에서는, (1) 양자 컴퓨터를 사용해 특정 반응의 자유에너지 프로파일을 계산하거나, (2) 양자 회로를 분자 생성 GAN에 통합해 후보 생성 품질을 높이는 등의 시도가 보고되었다. Q-Drug처럼 분자를 이진 임베딩으로 인코딩한 뒤 양자영감(quantum-inspired) 최적화 알고리즘으로 1/20~1/10 수준의 시간에 더 우수한 후보를 찾는 프레임워크도 제안되었다.

구글이 2025년에 발표한 “Quantum Echoes” 알고리즘은 특정 양자 시뮬레이션에서 기존 슈퍼컴퓨터 대비 13,000배 빠른 속도를 보이며, NMR 관련 분자 동역학과 신소재·약물 탐색에 적용 가능성을 제시했다. 물론 현재로서는 개념검증(proof-of-concept) 단계에 가까우며, 실제 신약개발 파이프라인에 통합되기 위해서는 하드웨어 규모·오류 보정, 알고리즘 안정성, 비용 구조 등 해결해야 할 과제가 많다.

#### 6. 산업 구조와 한국의 기회

이러한 기술 변화는 산업 구조에도 큰 변화를 예고한다. 일례로, Eli Lilly는 2025년 NVIDIA와의 협력을 통해 DGX 기반 슈퍼컴퓨터를 구축해, 수백만 실험 데이터를 학습하는 AI 모델을 훈련하고 이를 TuneLab이라는 플랫폼 형태로 외부 바이오텍에도 제공할 것이라고 밝혔다. 이는 빅파마가 약을 만드는 회사를 넘어서서 AI·데이터 플랫폼까지도 개발·활용·제공하는 확장성을 보여준다.

한편, Lila Sciences는 “AI Science Factory”라는 개념으로, 대형 자동화 실험실과 특화된 AI 모델을 결합해 연속적으로 과학적인 발견을 찾아내는 대규모 시스템 개발을 목표로 10억 달러 이상의 기업가치를 인정받았다. Excelsior Sciences 역시 모듈형 언어처럼 작동하는 “smart blocs” 플랫폼과 단일 자동화 시설을 통해, 통상 수개월 걸리던 저분자 최적화 과정을 2주까지 줄이고, 임상 진입까지 최대 18개월을 단축하겠다는 비전을 제시하고 있다.

이런 흐름을 종합해 보면, 향후 AI 신약개발의 승자는 “알고리즘만 뛰어난 회사”가 아니라, 고성능 컴퓨팅 인프라(HPC·클라우드), 대규모·고품질 바이오·의료 데이터, 자율 실험실을 비롯한 실험 인프라, 이를 연결하는 소프트웨어·플랫폼을 통합적으로 구축하여, 이를 외부 파트너와 공유·확장할 수 있는 회사가 될 가능성이 크다.

한국 제약·바이오 산업은 앞선 장에서 언급한 대로 IT 인프라와 인재 측면에서 강점을 지니고 있다. 여기에 국가 차원의 AI 신약 HPC·데이터 허브와 대학·병원·기업이 공동으로 사용하는 자율 실험실 테스트베드를 구축하고, 글로벌 양자·클라우드 기업과 조기에 협력한다면, “AI 신약개발 기술을 가장 먼저 실험하는 실험장(testbed)”으로서 의미 있는 위치를 점할 수 있을 것이다.

#### 기술·규제·윤리적 한계와 과제

AI 신약개발의 가장 근본적인 한계는 데이터에 있다. 모델은 훈련 데이터의 범위와 품질을 넘어설 수 없기 때문에, 편향되거나 불완전한 데이터는 잘못된 예측과 위험한 의사결정으로 이어질 수 있다. 비임상·임상 분야에서는 실패한 후보에 대한 데이터가 비공개인 경우가 많고, 병원 간·국가 간 데이터 표준이 달라 통합 분석이 어렵다. 이로 인해 AI 모델이 특정 인종·성별·지역에 치우친 데이터를 학습하거나, 실제 임상현장에서 마주치는 복잡한 환자군을 제대로 반영하지 못할 위험이 존재한다. 의료 AI 모델이 동일한 임상상황에서도 환자의 사회경제적 특성에 따라 서로 다른 진단·치료를 권고하는 편향이 관찰되었다는 최근 연구는 이러한 우려를 뒷받침한다.

모델의 해석 가능성과 재현성 부족도 문제다. 딥러닝 기반 생성형 모델은 수백만~수억 개의 파라미터를 지닌 ‘블랙박스’에 가까기 때문에, 규제기관과 연구자가 “왜 이 구조를 추천했는가?”를 이해하기 어렵다. 이로 인해 AI가 개입한 의사결정의 책임 소재와 검증 기준을 설정하는 데 어려움이 따른다. 최근 AI 신약개발 연구자들은, 향후 발전을 위해 데이터 표준화, 모델 개발의 투명성, 독립적 재현성 검증, 설명가능한 AI 도입이 필수적이라고 강조한다.

규제 환경 역시 아직 정립 단계다. 미국 FDA와 EMA 등은 AI가 개입한 신약개발에 대해 별도의 허가 트랙을 두고 있지는 않으나, 모델과 데이터의 검증에 관한 가이드라인을 점진적으로 마련하고 있다. 동물실험 축소를 목표로 AI·인실리코 모델을 적극 도입하려는 움직임이 있지만, 규제기관 입장에서 기존 독성시험 패러다임을 전면 대체하는 데는 신중할 수밖에 없다. 한국을 포함한 다수 국가에서 AI 관련 법·제도가 아직 모호한 것도 산업화에 장애요인이 될 수 있다.

윤리·사회적 측면에서는 데이터 프라이버시, 알고리즘 편향, 책임 소재, 고가의 독점 플랫폼에 대한 의존 등이 중요한 쟁점이다. 환자 데이터의 상업적 이용과 AI 알고리즘의 불투명성이 결합할 경우, 환자의 권리와 사회적 신뢰가 훼손될 수 있다는 우려도 있다. 또한, 신약개발 과정에서 AI가 수행하는 역할이 커질수록, 인간 연구자의 전문성이 어떻게 재정의되어야 하는지, 교육·훈련은 어떻게 바뀌어야 하는지에 대한 논의도 필요하다. AI를 ‘인간을 대체하는 존재’가 아니라 ‘새로운 연구 동료(co-scientist)’로 바라보는 관점 전환이 이루어지지 않는다면, 기술 도입 과정에서 불필요한 저항과 오해가 발생할 수 있다.

## 국내 제약·바이오 업계를 위한 전략 제언

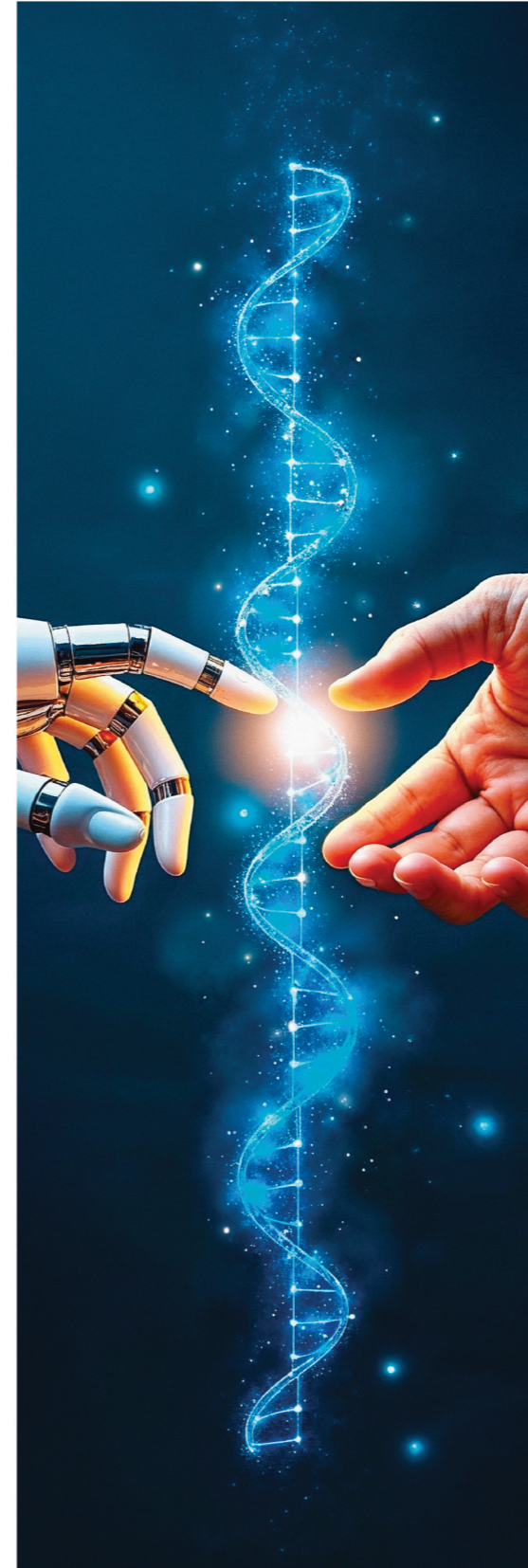
첫째, 데이터 전략의 재정립이 필요하다. AI 신약개발에서 가장 중요한 자산은 알고리즘이 아니라 데이터다. 개별 기업이 보유한 데이터만으로는 충분한 범위와 다양성을 확보하기 어렵기 때문에, 컨소시엄 기반의 데이터 공유·통합 플랫폼이 필수적이다. 앞으로는 규제기관·병원·학계와의 협력을 통해, 개인정보를 보호하면서도 연구·개발에 활용 가능한 고품질 데이터셋을 구축하는 것이 중요하다.

둘째, 조직적인 AI-실험 융합이 필요하다. 많은 회사에서 AI팀과 생물학 팀·화학 팀이 조직적으로 분리되어 있어, 모델 개발과 실험 설계가 단절적으로 이뤄진다. AI 과학자와 합성·실험 연구자를 한 조직 안에 통합하고 공동의 연구 목표를 지향하는 사례는, 신약개발 워크플로우 전체에 AI를 긴밀히 활용하는 시도로 볼 수 있다. 국내 제약사들도 “AI팀이 결과를 던지고 실험팀이 검증하는” 구조를 넘어서, 타깃 발굴부터 후보 선정, 비임상 설계까지를 공동으로 논의·실행하는 긴밀한 cross-functional 팀 구성이 요구된다.

셋째, 전략적인 선택과 집중이 필요하다. Insilico Medicine처럼 직접 파이프라인을 개발하거나, Isomorphic Labs처럼 범용 플랫폼을 구축해 여러 파트너와 공동개발·라이선스 아웃을 추구하는 전략이 있는가 하면, 특정 질환(암·희귀질환·면역질환 등)에만 집중해 도메인 지식과 데이터를 축적하는 전략도 가능하다. 국내 기업은 자본·데이터·인력 규모를 고려해, 어느 정도의 플랫폼 범용성을 지향할지, 어느 질환 영역에서 글로벌 경쟁력을 높일지 전략적 선택이 필요하다. 모든 것을 한 번에 다 하려는 ‘만능 전략’은 오히려 자원 분산과 실행력 저하를 초래할 수 있다.

넷째, 규제·표준화 선제 대응이 중요하다. 앞으로 규제기관은 AI 활용 신약개발에 대해 데이터 품질·모델 검증·설명가능성 등에 대한 구체적인 기준을 요구할 가능성이 크다. 국내 기업이 뒤늦게 이러한 요구를 쫓아가는 대신, 자체적으로 데이터 표준화, 모델 감사(audit), 독립적 재현성 검증 프로세스를 구축하고, 규제기관과의 대화에 적극적으로 참여한다면, 한국은 “AI 신약개발 규제 샌드박스”로서의 매력도 또한 높일 수 있을 것이다.

마지막으로, 인력 양성과 문화적 전환이 병행되어야 한다. AI 신약개발은 데이터 과학자, 소프트웨어 엔지니어, 화학·생물학 연구자, 임상, 규제 전문가가 긴밀히 협력해야 하는 전형적인 융합 분야다. 대학·대학원·전문 교육과정에서 이러한 융합형 인재를 체계적으로 양성하고, 기업 내부에서도 실패를 허용하는 실험 문화와 데이터 공유 문화를 만드는 것이 중요하다.



## 결론 - 향후 5~10년을 향하여

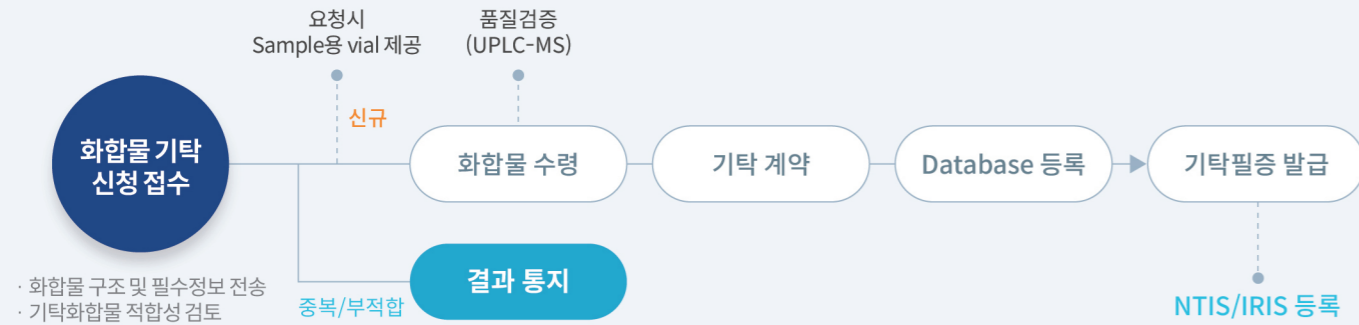
AI는 이미 신약개발의 여러 지점에서 “있으면 좋은 도구”를 넘어, 없이는 경쟁이 어려운 ‘필수 인프라’로 자리 잡아가고 있다. 비임상과 임상 개발 시간과 비용이 기존 대비 절반 수준까지 줄어들 수 있다는 전망도 조심스럽게 제기되고 있으며, 일부 회사는 실제로 탐색·최적화 기간을 수년에서 1~2년 수준으로 단축하는 성과를 보여주고 있다. Insilico Medicine, Recursion Pharmaceuticals 등 여러 기업의 초기 임상 파이프라인은 “AI가 설계한 약이 임상에 들어갈 수 있다”는 사실을 증명했다.

그러나 아직 규제 승인에 도달한 AI 기반 설계 약물은 없으며, 많은 기업이 기대에 비해 더딘 성과를 경험하고 있다는 점도 사실이다. AI 신약개발의 진정한 가치는, 단기간에 “한두 개의 히트”를 내는 것이 아니라, 10~15년에 걸친 거대한 R&D 과정에서 데이터를 축적하고, 적극적으로 AI 활용 가능 시스템으로 재구성하여, 실패를 줄이며, 보다 정밀한 의사결정을 가능하게 하는 데 있다.

한국 제약·바이오 산업은 강력한 IT 인프라와 우수한 인재풀, 비교적 일관된 의료보험 시스템이라는 장점을 지니고 있다. 여기에 AI 신약개발을 위한 데이터·규제·인력 전략이 더해진다면, 우리는 “글로벌 빅파마를 따라가는 후발주자”를 넘어, 새로운 R&D 패러다임을 실험하고 구현하는 선도자 역할을 할 수도 있다. AI는 마법 지팡이가 아니지만, 제대로 다룬다면 기존에 도달할 수 없었던 영역에 이르는 새로운 도구가 될 수 있다. 앞으로 5~10년은, AI가 신약개발에서 ‘보조 도구’에서 ‘공동 연구자’로 자리매김하는 과정을 지켜보는 결정적 시기가 될 것이다.

## 화합물 기탁 절차

문의 E-mail. chembank@kRICT.re.kr Tel. 042-860-7190 홈페이지. www.chembank.org 통합데이터플랫폼. korea.chembank.org



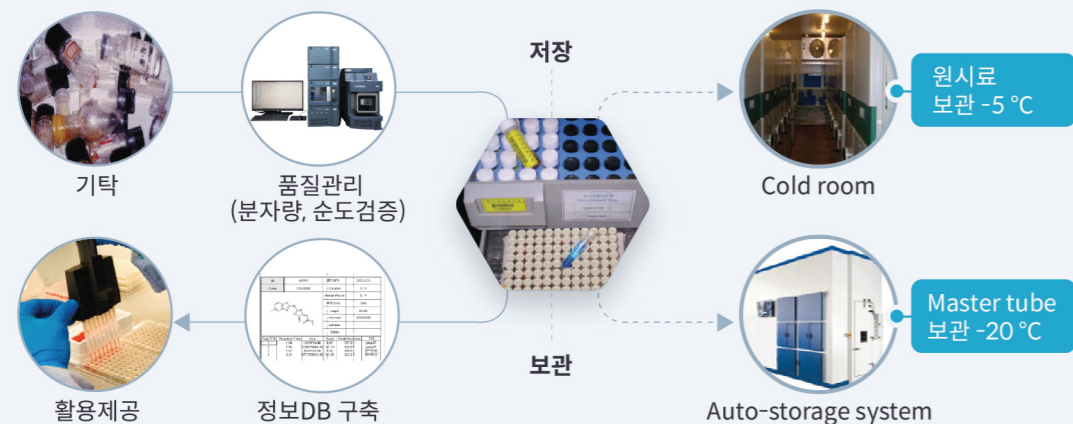
### 기탁화합물 범위 및 기준

- **범위** 유기합성 화합물 및 단일성분 천연물
- **품질기준** 화합물 양 > 10 mg (필수), 순도 > 90% (한국화합물은행에서 UPLC-MS로 검증) <sup>1</sup>H-NMR 자료 제출(필수)

### 기탁자 혜택

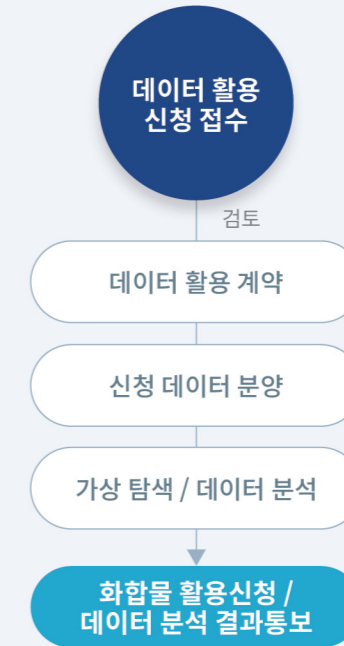
- 기탁화합물에 대한 활용 결과 도출시 그 결과를 통보 받을 수 있다.
- 기탁화합물의 활용결과 Hit가 도출된 경우
  - 활용자와 협의하여 후속연구에 공동연구자로 참여할 수 있다.
  - 활용결과를 논문 또는 특허로 출판할 경우: 기탁자의 기여도에 따라 공동저자 또는 공동출원인으로 참여 할 수 있다.
  - 기탁화합물의 활용결과 수익이 발생할 경우: 기탁자의 기여도에 따라 수익의 일부를 분배 받을 수 있다.

### 화합물 보관 및 관리체계



## 데이터 활용 절차

문의 E-mail. chembank@kRICT.re.kr Tel. 042-860-7190 홈페이지. www.chembank.org 통합데이터플랫폼. korea.chembank.org

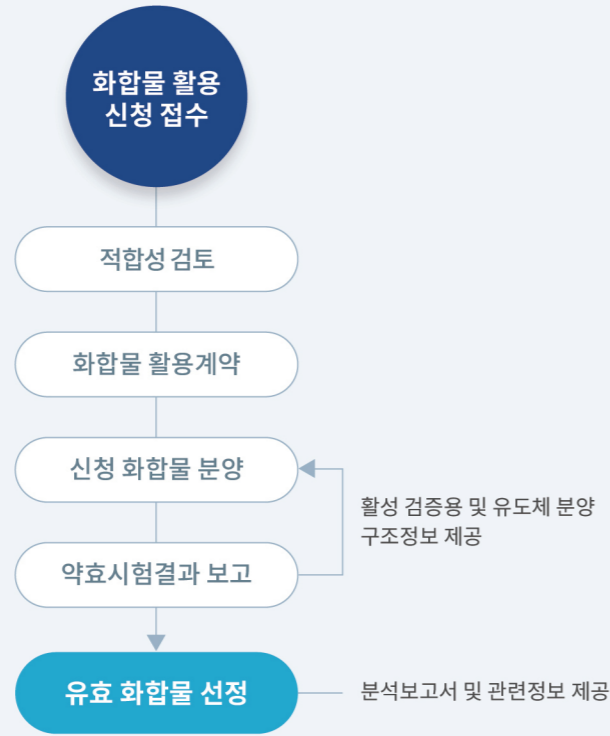


### 정보제공 데이터 종류

분류	소분류
화합물 구조 정보	전체(분양 가능) 라이브러리
	구매화합물 라이브러리
	대표 라이브러리
	임상화합물 라이브러리
	천연물 라이브러리
	Fragment 라이브러리
	Kinase 라이브러리
	PPI 라이브러리
	GPCR 라이브러리
	항감염 라이브러리
PharmaCore Collection	
약효시험결과 정보	공개 가능한 정보

## 화합물 활용 절차

문의 E-mail. chembank@krcit.re.kr Tel. 042-860-7190 홈페이지. www.chembank.org 통합데이터플랫폼. korea.chembank.org



### 화합물 사용료 규정

- 화합물은 무상으로 제공합니다.
- 화합물 제공에 수반되는 실비용(plate, 분주기 tip, 튜브 cap, 택배비용 등)은 이용자가 부담합니다.
- 중소기업 / 벤처 / 대학교 / 공공연구기관은 실비의 50%만 이용자가 부담합니다.

### 화합물 분양실비 부과

\* 부가세 별도

Plate 종류	단가(2026년)	대기업 / 중견기업	중소기업 / 벤처 / 대학교 / 공공연구기관	기타 수수료 (택배비용)
96-well (80종 / 1Plate)	38,600원	38,600원	19,300원	5,000원
384-well (320종 / 1Plate)	148,900원	148,900원	74,450원	

· 2026년 4월부터 택배비용은 실비에 포함됨.

## 화합물 및 데이터의 활용 결과(논문, 특허 등) 권리관계 규정

### 규정목적

- 한국화합물은행은 기탁자들이 기탁한 화합물을 바탕으로 운영되고 있습니다.
- 기탁자들의 화합물 기탁을 장려하고, 동시에 화합물 및 데이터 사용자들의 불편함을 최소화하기 위하여 한국화합물은행이 제공한 화합물 및 데이터를 활용하여 도출된 연구결과(논문, 특허 등)의 권리관계는 아래와 같은 규정을 적용합니다.

### 규정내용

#### 활용결과(논문, 특허 등) 권리관계 규정 내용

1. 기탁자가 단순기탁 이외의 추가적인 기여가 없는 경우에는 화합물 기탁자를 논문의 사사(acknowledgement) 에 기재하는 것이 원칙입니다.
2. 기탁자가 추가적인 기여(유도체 합성 제공, 관련 정보제공 등)가 있을 경우에는 기여정도에 따라 기탁자를 논문 공저자 및 특허 공동발명인(공동출원인)으로 포함을 권장합니다.
3. 기탁자가 물질특허가 있는 경우, 활용결과에 대한 **용도특허**는 사용자(발견자)가 취득할 수 있습니다.

\* 활용기관은 한국화합물은행의 라이브러리를 활용한 연구결과를 논문, 특허 등에 발표 또는 공개할 경우 “한국화합물은행 제공 화합물과 데이터를 활용하여 연구가 진행되었다.”는 사사 또는 문구를 기재하여야 합니다.

\* 한국화합물은행은 화합물과 데이터 활용에 관한 지식재산권(intellectual property)에 관여하지 않습니다.

한국화합물은행 활용결과의 권리 규정은 과학계에서 통용되는 연구결과 기여도에 대한 **연구윤리 기본원칙**을 따르고 있습니다.

## 후속연구를 위한 화합물 추가합성 및 구매 진행 안내

1. 한국화합물은행은 소량의 화합물(10 mg)만 기탁 받아서 보유하고 있으며, 최대한 많은 연구자들의 활용을 위해 1차 스크리닝 및 Hit 화합물의 검증에 필요한 최소량만 제공하고 있습니다. 후속단계(*in vivo* 실험 및 약물성/독성 시험 등) 실험에 필요한 충분한 양의 화합물은 서비스하고 있지 않습니다.
2. 후속단계의 실험을 위하여 화합물이 추가적으로 더 필요한 경우에는 아래의 방법을 이용하시기 바랍니다.
  - 1) 구매 가능한 화합물은 구매하여 사용(구매처 정보제공)
  - 2) 화합물 원기탁자와 협의하여 공동연구 진행
  - 3) 자체 연구진 또는 전문가를 활용한 합성 진행
3. 한국화합물은행(KCB) 활용 화합물 중에서 상용 화합물의 구매를 원하시는 경우, KCB에서 구매한 vendor 정보를 제공해 드립니다. 화학물질의 해외 구매 시 화평법 및 화관법에 대한 신고 및 등록 의무를 사전에 반드시 확인 바랍니다. (화학물질정보처리시스템, <https://kreach.me.go.kr/>)



공동 활용을 통한 화합물 및 활용데이터 가치 재창출

**We take care of your compounds and Create new value!**



**화합물 기탁 · 활용 · 데이터 문의**

- 홈페이지 : [www.chembank.org](http://www.chembank.org) / 통합데이터플랫폼 : [korea.chembank.org](http://korea.chembank.org)
- 주소 : (34114) 대전광역시 유성구 가정로 141 한국화학연구원 한국화학물은행
- 전화 : 042-860-7190 / 팩스 : 042-860-7096 / E-mail : [chembank@kRICT.re.kr](mailto:chembank@kRICT.re.kr)

한국화학물은행은 국가연구개발사업의 화합물  
연구성과 관리·유통 전담 기관으로 지정되어 있습니다.  
[과학기술정보통신부 고시 제2022-41호]

