

Abstracts

Mathew D. Halls

Senior Vice President
Materials Science
Schrödinger

Accelerating Materials Development with Physics and AI: New Capabilities for Pharmaceutical Formulation in the Schrödinger MS Platform

物理学とAIによる材料開発の加速： Schrödinger MSプラットフォームにおける医薬品製剤 開発の新機能

Schrödinger is enabling the next generation of high performance materials and formulations, accelerating discovery and deployment by seamlessly integrating physics-based simulations with advanced AI. Our unified platform moves beyond incremental experimental iteration to provide efficient, targeted evaluation of materials and formulations across vast design spaces. This presentation showcases key platform enhancements across quantum mechanics (QM), molecular dynamics (MD), and machine learning (ML/AI), underscoring our scientific and engineering leadership position, leveraging deep physics knowledge. Key advancements include:

- **Crystal Structure Prediction Advances:** Expanding crystal-type coverage in our flagship Crystal Structure Prediction (CSP) technology; including $Z'=2$, monohydrates, non-aqueous solvents, and salts.
- **Coarse Grained Molecular Dynamics:** bidirectional-mapping (AA \leftrightarrow CG), CG modeling advances for simulating complex bulk systems like lipid nanoparticles and protein solutions.
- **Generative AI & Accelerated Discovery:** Implementation of the REINVENT method (a generative model with multi-objective reinforcement learning) to efficiently discover novel and synthetically viable high-performance materials.
- **ML Predictions for Biological Formulations:** Support for protein descriptors enabling prediction and optimization of materials formulations containing proteins and other chemical entities.

We will also share our vision for the future, including agentic AI-driven simulations (*Bunsen*) that automate and optimize *entire in silico* project workflows, alongside new MLFF developments, and automated reactivity tools leveraging GPU-accelerated QM. Attendees will see how these powerful new features and capabilities translate into breakthrough applications for pharmaceutical formulations.

シュレーディンガーは、物理ベースのシミュレーションと高度なAIをシームレスに統合することにより、次世代の高性能材料および製剤の実現を可能にし、その探索と実用化を加速させています。当社の統合プラットフォームは、これまでの漸進的な実験の繰り返し(試行錯誤)から脱却し、広大なデザインスペース全体にわたって、材料や製剤の効率的かつ的確な評価を可能にします。

本発表では、量子力学(QM)、分子動力学(MD)、および機械学習(ML/AI)におけるプラットフォームの主要な機能強化を紹介し、深い物理学的知見を活用した当社の科学的・工学的リーダーシップを実証します。

主な進展は以下の通りです。

- **結晶構造予測(CSP)の進歩:** 当社のフラッグシップ技術である結晶構造予測(CSP)における対応結晶タイプの拡充($Z'=2$ 、一水和物、非水溶媒、および塩を含む)。
- **粗視化分子動力学(CG-MD):** 双方向マッピング(AA \leftrightarrow CG)の導入、および脂質ナノ粒子(LNP)やタンパク質溶液などの複雑なバルク系のシミュレーションに向けたCGモデリングの進化。
- **生成AIと探索の加速:** 多目的強化学習を用いた生成モデルである「REINVENT」手法の実装により、新規かつ合成ルートが確立可能な高性能材料の効率的な探索を実現。
- **バイオ製剤向けのML予測:** タンパク質記述子への対応により、タンパク質やその他の化学実体を含む材料・製剤の予測および最適化を可能に。

さらに、*in silico* プロジェクトのワークフロー全体を自動化・最適化する自律型AI(Agentic AI)駆動シミュレーション(*Bunsen*)をはじめ、新しい機械学習力場(MLFF)の開発、GPU加速型QMを活用した自動反応性ツールなど、今後のビジョンについても共有いたします。本発表を通じて、これらの強力な新機能が、医薬品製剤開発における革新的なアプリケーションにどのように結びつくのかを詳しくご紹介いたします。

Shiva Sekharan

Global Portfolio Leader,
Formulations & CSP
Schrödinger

Leveraging Schrödinger's Formulation Tools and Automated Workflows to Mitigate Technical Risks in Small Molecule Formulation

Schrödingerの製剤ツールと自動化ワークフローを活用した、低分子製剤における技術的リスクの軽減

For small-molecule developers interested in an out-licensing deal or partnership, the most overlooked driver of valuation isn't just your primary data—it's technical risk mitigation. Specifically, proactive investment in solid-state characterization and crystallization process development can drastically alter your deal terms. The ability of a solid material to exist in two or more crystalline forms—is a make-or-break factor for drug success. While the chemical formula remains identical, the physical arrangement of molecules differs, which can radically alter the solubility, stability and bioavailability of the active pharmaceutical ingredient (API). Assessing polymorphism isn't just a regulatory hurdle; it is a critical strategy for ensuring safety, efficacy, and commercial viability. In this talk, I will demonstrate how early assessment of degradation, reactivity, catalysis, polymorphism and solubility of API is critical for accelerating small molecule drug discovery and formulation development timelines and fortify intellectual property of their asset.

アウトライセンス契約や提携に関心を持つ低分子開発者にとって、価値評価において最も見過ごされがちな要素は、一次データだけではなく、技術的リスクの軽減です。具体的には、固体状態の特性評価と結晶化プロセス開発への積極的な投資が、取引条件を劇的に変える可能性があります。固体材料が2つ以上の結晶形で存在できる能力(多形)は、薬剤の成功を左右する決定的な要因となります。化学式は同じでも、分子の物理的な配置が異なることで、原薬(API)の溶解性、安定性、バイオアベイラビリティが根本的に変化する可能性があります。多形の評価は、単なる規制上のハードルではなく、安全性、有効性、商業的実現可能性を確保するための重要な戦略です。本講演では、APIの分解、反応性、触媒作用、多形、溶解性を早期に評価することが、低分子創薬および製剤開発のタイムラインを加速し、資産の知的財産を強化するためにいかに重要であるかを実証します。