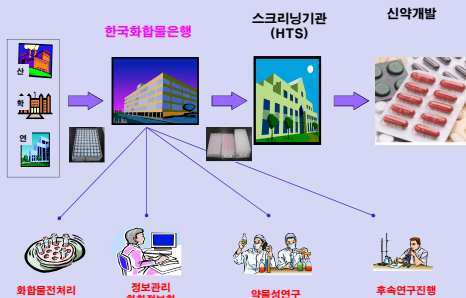


Drug Development with Korea Chemical Bank

Sun Woo Kim*, Jae Chun Woo, Sun Ho Kim, Joong-Kwon Choi
Korea Chemical Bank, Korea Research Institute of Chemical Technology

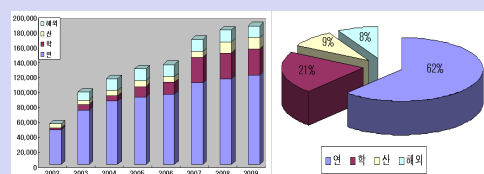
Korea Chemical Bank is operated by Korea Research Institute of Chemical Technology with participation of industries, academia and research institutions involved in new drug development. At present the chemical library of Korea Chemical Bank is composed of ~200,000 compounds from ~160 institutions and utilized in 365 high-throughput or medium-throughput screening campaigns by ~150 institutions. As numerous Hits were identified from the campaigns, many drug development projects are in progress in various area including cancer and diabetes.

Operation of KCB



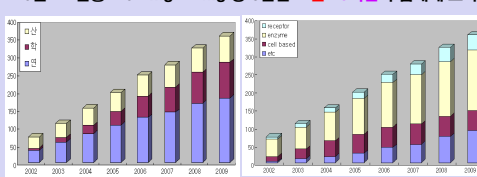
Origin of Chemicals

- 160개 기관에서 20만종 화합물 기탁
- 기탁제 외 15만종, 기탁제로 5만종
- 생체기능조절물질개발사업단 등 대형 사업단 중심으로 기탁
- 뉴욕대, BRI(캐나다), 중국농림대학, Bayer CS 등
- 국내 산 학 연 화합물 기탁



HTS Campaigns

- 매년 30~40건 이상의 약효시험에 활용 (기탁제 이전 20건)
- 국내 public sector의 HTS의 대부분 (추정)
- 2010년 현재 160개 기관에서 360개 약효시험에 활용
- Biochemical assay에서 점차 Cell-based assay로
- 40여개 이상의 산 학 연 공동 신약개발 연구 과제 도출



Library Management

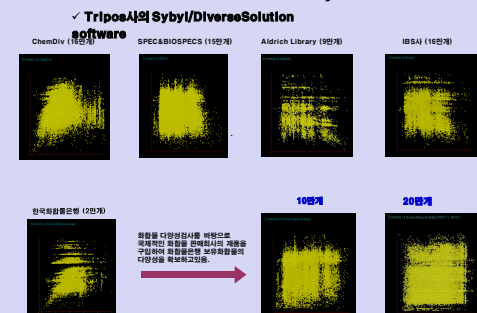


PharmaCore

- 필요성: 20만종 이상의 화합물에 대한 체계적인 골격 분류 필요
- 내용: 신약개발 가능성 높은 다양한 골격 화합물 확보 기반 조성
- 방법: 바코드 튜브 관리체계 도입, 분류체계에 따라 화합물 재편성
- 관리: 바코드 기반 정보관리 S/W 개발 (PIMS)
- 기대효과: 골격 다양성 관리, 대표 및 focused 라이브러리 구축



Chemical Diversity



Physical Properties

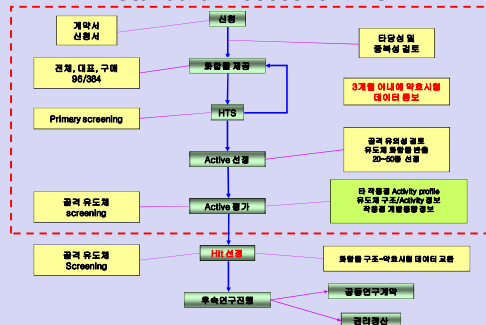
기본적인 약물성

보유 화합물에 대한 물성 정보에서 Lipinski rule과 Veber rule에 따른 drug-likeness를 고려하면 대부분의 화합물이 신약으로 개발 가능한 물성을 가지고 있다는 것을 확인할 수 있음.



preADME

Standard Process for HTS



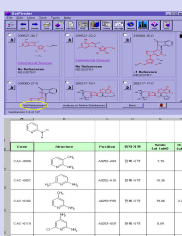
HTS: Hit Selection

- 기탁된 화합물은 신약개발에 활용하여 유도체질(Hit) 도출
- 기탁기관과 스크리닝 기관은 화합물 구조와 활성데이터를 교환하여 후속개발여부를 판단
- 기탁/스크리닝 기관의 역할
 - 추가 유도체 합성, SAR 연구
 - 신약개발 후속연구에 공동 참여
 - 각자의 권리정산 후 독자개발
- 권리정산 예시 (소유 연구비에 따라)

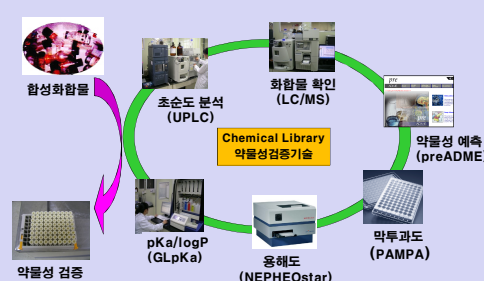


Hit Evaluation

- ADME 예측 결과 제공
 - 분자설계연구센터 제공 프로그램 이용 (<http://preadmet.bmdrc.org>)
 - Drug-likeness 판별
 - Absorption 관련 예측 결과
- Hit 화합물 유도체성 검사
 - 골격 검색을 통해 SAR(Structure-Activity Relationship) 검토
 - 다른 작용점에서 도출된 Hit 정보 제공
 - Hit DB 관리를 통한 정보 축적



Drugability



Examples

