KCB
한국화합물은행 뉴스레터

2020년 제1호

KCB Newsletter
2020년 제1호

KRICT 한국화학연구원 Korea Research Institute of Chemical Technology

한국화합물은행 Korea Chemical Bank

과학기술정보통신부지정
연구성과 관리·유통 전담기관
- 화합물 전담기관 -

한국화합물은행 뉴스레터
2020 Vol. 1

발행일 : 2020년 1월
발행인 : 이미혜
편집인 : 이선경
발행처 : 한국화합물은행

한국화합물은행은 국가연구개발사업 수행을 통해 창출된 연구성과 중 화합물 및 관련 정보의 관리·유통 전담기관으로 지정되어 있습니다.
[과학기술정보통신부 고시 제2019-58호]

CONTENTS

한국화합물은행은 국내에서 합성되는 화합물(유기화합물 및 천연물) 및 관련정보를 범국가적 차원에서 통합·관리하고 공동으로 약효시험에 활용함으로써 국내 신약개발 및 바이오 연구를 지원하기 위하여 지난 2000년에 설립되었으며 64만종 이상(2019년)의 화합물을 수집, 관리하고 있습니다.

한국화합물은행 소식

웹 기반 신약소재 화합물 통합 데이터베이스 시연회 개최

한국화합물은행은 ㈜파로스아이비티와 공동으로 웹 기반 화합물 통합 데이터베이스 개발을 완료하고, 2019년 12월 13일 오후 2시 한국화학연구원에서 한국화합물은행 자문위원들과 연구원들을 대상으로 시연회를 개최했다.
웹 기반 신약소재 화합물 통합 DB는 신약개발 연구자들에게 화합물은행에 축적된 64만종 이상의 화합물 및 이와 연관된 650만건 이상의 약효시험 데이터 중 공개 가능한 정보를 제공할 것이다. 또한 화합물 기탁 및 반출, 데이터 입력 및 반출 신청을 웹에서 연구자가 직접 진행할 수 있다. 사용자 권한 설정 등의 보안 검증을 완료한 후 2020년 하반기에 전체 서비스 될 계획이다.

웹 기반 신약소재 화합물 통합 DB 시연회 개최

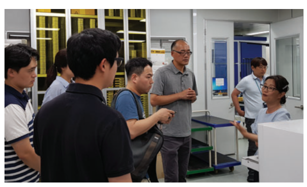
Focused 라이브러리 재구성

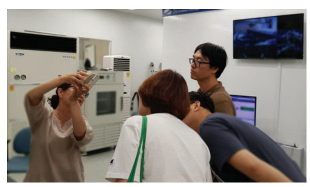
약물 재창출 연구의 확대로 임상 라이브러리 활용 신청이 늘어나고 있으므로 양질의 임상화합물 확보 및 고도화가 필요하였다. 한국화합물은행은 2019년 하반기에 기존 임상 라이브러리에서 임상화합물로 부적합한 화합물(Inorganic, Alkylating agents, 유기인제 농약 등)을 제외하여 2,000여종의 신규 임상 라이브러리를 재구성하였으며, 소진되거나 새로 임상에 진입한 화합물을 확보하여 2020년 상반기에는 신규 500여종이 추가된 전체 2,500여종의 임상 라이브러리를 제공할 계획이다.
임상화합물 반출과 함께 Broad Institute Cancer Program (https://clue.io/repurposing-app) 및 DrugBank (https://www.drugbank.ca)에서 제공하는 정보를 취합하여 활용자에게 제공하고 있다.
Fragment 화합물도 950여종 화합물을 추가 확보하여 chemical space를 확대하였으며, 2020년 상반기부터 제공할 것이다.

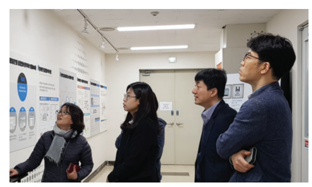
주요방문인사

No	방문일자	방문기관
1	2019. 07. 03	YPF 견학단 랩투어
2	2019. 08. 06	고려대학교 조은성 교수
3	2019. 08. 07	㈜에일론 윤종오 박사
4	2019. 08. 08	일양약품
5	2019. 08. 08	한독약품
6	2019. 08. 14	LG화학 그린바이오팀
7	2019. 08. 14	한국교원대학교 교원연수자
8	2019. 08. 20	독일NOMAD 쉐플러 교수
9	2019. 08.27	㈜샤페론 김정태 전무이사, 이송진 상무이사
10	2019. 08. 30	KBS 한국방송
11	2019. 10. 15	TargetMol David Wang
12	2019. 10. 22	한국과학기술원 김세윤 교수
13	2019. 10. 24	영진약품
14	2019. 10. 30	대웅바이오
15	2019. 11. 15	한국생명공학연구원 김형진 박사
16	2019. 11. 21	㈜파마젠 임석태 사장, 이새벽 상무, 허정희 부장
17	2019. 12. 11	국립암센터 인체유래물은행
18	2019. 12. 17	광주과학기술원 송우근 교수


일양약품 일행


LG화학 그린바이오팀 일행


KBS 한국방송 일행


국립암센터 일행

국내 · 외 홍보 및 교류

구분	일정	내용	장소
홍보	2019. 09. 30 ~ 10. 02	한국분자세포생물학회 정기학술대회 부스 운영	서울 코엑스
	2019. 11. 13 ~ 15	한국유기합성학회 학술대회 홍보원고 게재	용인 한화리조트
	2019. 11. 20	R&D 성과관리 및 활용관련 교육강의	국가과학기술인 인력개발원 (KIRD) 대전교육센터
	2019. 11. 21 ~ 22	한국유전학회 국제학술대회 부스 운영	차바이오컴플렉스
	2019. 11. 27 ~ 30	AHeDD(Asia Hub for e-Drug Discovery)2019 /IPAB(병렬생물정보처리 이니셔티브)2019 공동 심포지엄	일본 가와사키
해외 네트워크	2019. 09. 24	Cambridge 대학교 Biomedical Complex 방문	영국 케임브리지
	2019. 11. 27	DBCLS 방문	일본 도쿄
	2019. 12. 04	NCBI 방문	미국 메릴랜드
	2019. 12. 04	NCATS/NCGC 방문	미국 메릴랜드
	2019. 12. 05	USP 방문	미국 메릴랜드

영국 Cambridge Biomedical Complex

일시 및 장소

2019년 9월 24일, 영국 케임브리지
Cambridge 대학 및 캠퍼스 내 Biomedical Complex

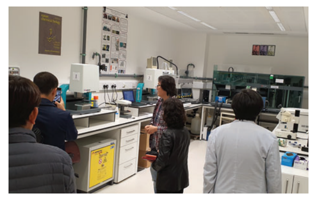
목적 및 내용

Cambridge Biomedical Complex

- 기초(대학), 임상(병원), 기업(제약사 및 벤처)이 cluster 내에서 긴밀한 파트너쉽을 형성하고 협동 연구 추진
- GSK 및 AstraZeneca(최근 cluster 내 회사 이전 추진) 등 글로벌 기업과의 공동 연구뿐 아니라 최근 5년간 105개의 신규 창업을 주도하였음

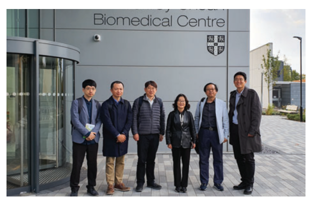
MRC Laboratory of Molecular Biology (LMB) 방문

- Watson & Crick, Fred Sanger 등 12회의 노벨상을 배출하고, 세계 최고 수준의 구조 연구 장비, 인력 및 역량 보유
- MRC (Medical Research Council)의 block funding으로 Cryo-EM 등 고가 장비의 운영 및 연구 수행

Milner Therapeutics Institute 방문 및 회의

- 정부 및 지자체의 block funding 및 산업계 수탁으로 중개 연구 수행
- 인공지능 기반 연구 소개 및 논의

일본 DBCLS

일시 및 장소

2019년 11월 27일, 일본 도쿄
DBCLS (DataBase Center for Life Science)

목적 및 내용

데이터베이스 시스템 및 자연어 처리 관련 최신 정보 수집 및 협력 방안 논의


미국 NCBI

› 일시 및 장소

2019년 12월 4일, 미국 메릴랜드
NCBI(National Center for Biotechnology Information)

› 목적 및 내용

미국 NCBI의 PubChem을 방문하여 한국화합물은행 라이브러리 및 활용 데이터의 정보 공유와 시스템 관리 등에 대한 협력 방안 논의

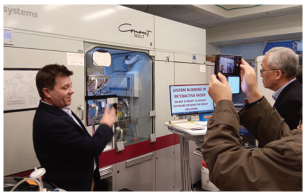
미국 NCATS/NCGC

› 일시 및 장소

2019년 12월 4일, 미국 메릴랜드
NCATS/NCGC
(National Center for Advancing Translation Sciences/NCATS Chemical Genomics Center)

› 목적 및 내용

Early discovery 단계의 중개 연구를 수행하는 NCATS에 방문하여 NCATS의 NPACT 라이브러리를 포함한 라이브러리 구축 및 활용 현황에 대한 소개와 시설 등에 대한 견학. 한국화합물은행 및 의약바이오연구본부와 라이브러리 교환을 포함한 협력관계 구축에 대한 논의



미국 USP

› 일시 및 장소

2019년 12월 5일, 미국 메릴랜드
USP(United States Pharmacopeia)

› 목적 및 내용

2020년에 200주년을 맞는 USP를 방문하여 품질관리 시설 견학 및 의약품/천연물/건기식 등의 규격 표준화 및 표준품 관리와 데이터 편집 등에 대한 논의

화합물 확보 현황

한국화합물은행은 2019년 64만종 이상의 화합물을 보유하고 있으며 다양성, 약물성, 독창성이 우수한 고수준 신약소재 화합물 라이브러리를 제공하기 위하여 다양한 방법으로 우수한 화합물을 확보하고 있다.

1 연구성과 기탁[법적의무 기탁]

「국가연구개발사업의 관리」등에 관한 규정 제25조13항에 따라 국가연구개발사업 수행을 통해 창출된 화합물은 연구성과 관리·유통 전담기관인 한국화학연구원 한국화합물은행에 의무적으로 기탁하도록 되어 있다. 연구성과 기탁 효율제고를 위하여 2017년부터 국가연구과제 및 사업평가에 연구성과 기탁실적을 반영하고, 전담기관에 기탁된 성과만 인정 하도록 "국가연구개발 평가지침"이 개정되었다.

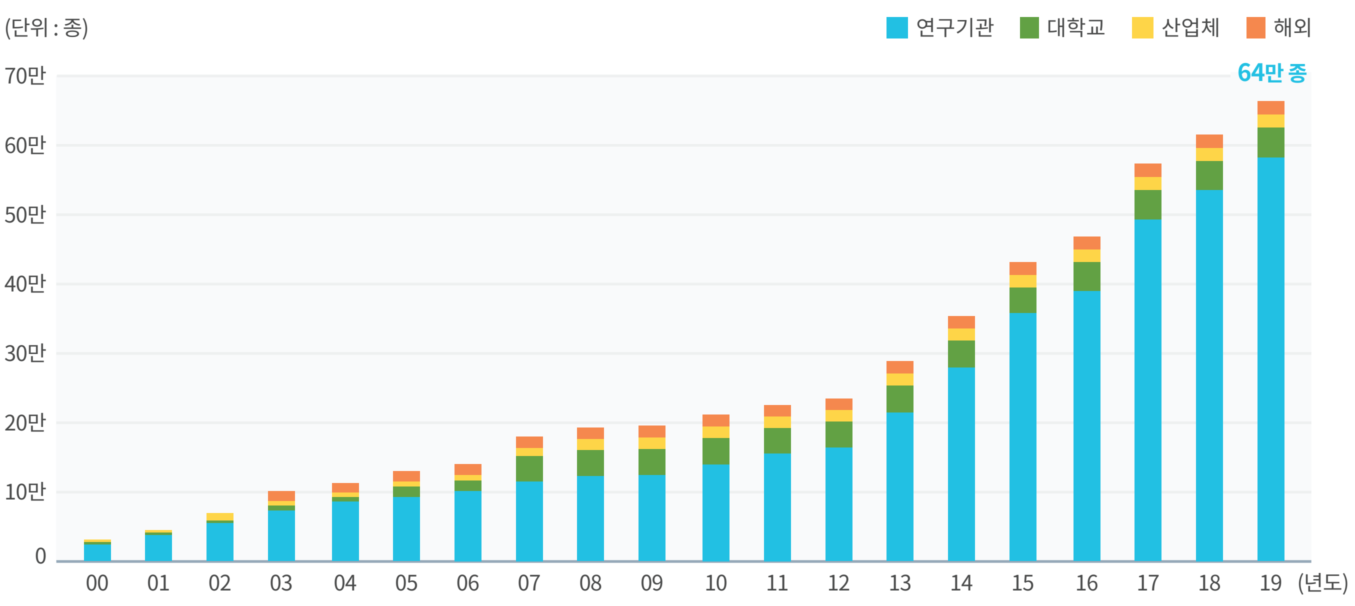
2 국내 전문가 공모 위탁합성

보유화합물의 구조 다양성 확대를 위하여 국내 합성 전문가를 대상으로 위탁합성 과제를 공모, 선정을 통하여 화합물을 확보하고 있다. 2014년부터 매년 15개 내외의 전문가 위탁합성 과제를 선정하고, 이를 통해 2019년까지 11,700여종을 확보하였다. 2020년에도 전문가 위탁합성 공모를 통하여 17개 과제에서 2,900여종을 확보할 예정이다.

3 특수 골격화합물 해외 구매

단순 기탁만으로 충족하기 어려운 화합물 다양성을 신속하게 확보하기 위하여 화학정보학 및 분자 모델링 기술을 활용하여 약물성 및 다양성 극대화를 고려한 특수 골격 화합물을 해외 vendor로 부터 선별하여 구매, 확보하고 있다. 2019년에도 약 3만여종의 화합물을 선별 구매하여 지속적으로 가치가 높은 라이브러리를 확보하여 연구자들에게 제공하고 있다.

화합물 확보 누계 현황 (2000~2019) 64만종 보유



데이터 활용 현황

한국화합물은행은 2018년부터 화합물 구조 및 공개 가능한 약효시험 데이터 정보를 제공하고 있다.
2019년에는 32건의 데이터를 제공하였고, Hit 및 SAR분석을 위한 구조정보도 139건 제공되었다.

데이터 지원 현황 (2019년 누적건수)

분류	소분류		지원건수
화합물 구조 정보	구매화합물 라이브러리		14건
	Focused 라이브러리	임상 화합물	2건
		GPCR 화합물	2건
		PPI 화합물	3건
	반출 가능한 라이브러리		15건
약효시험결과 정보	공개 가능한 정보		11건

화합물 활용 현황

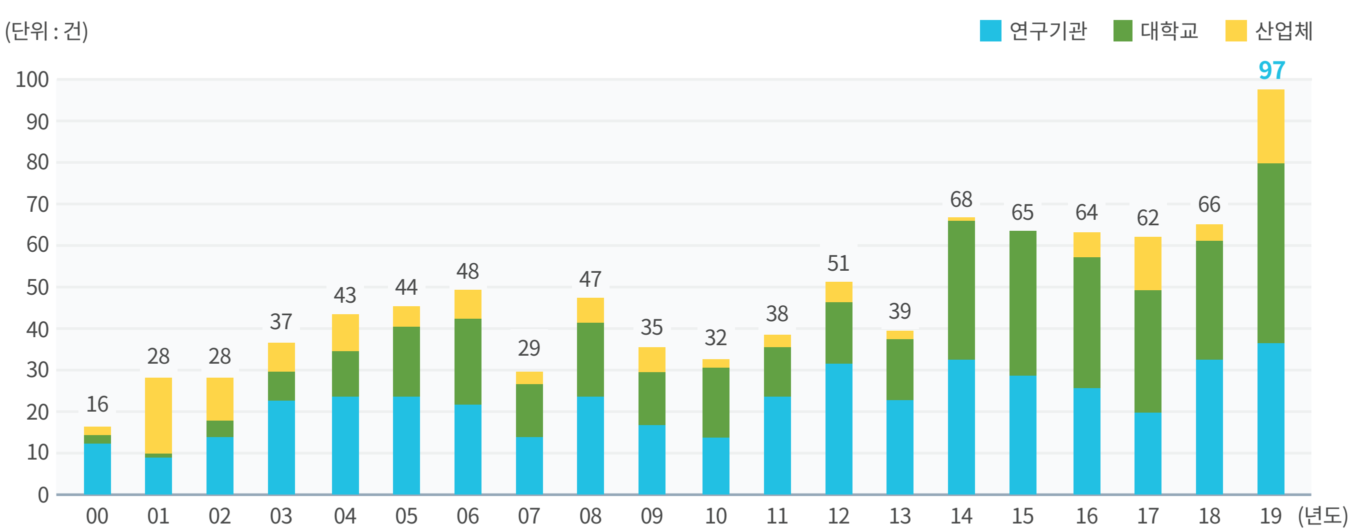
연 평균 60건 이상의 신규 작용점에 대하여 20만종 이상의 화합물이 국내 산 · 학 · 연에 제공되어 활용되고 있으며 현재까지 937건 이상의 약물 작용점에 대한 약효검색에 활용되었다. Hit 화합물에 대한 구조 정보 제공시 UPLC-MS 분석에 의한 품질 검증 자료를 기본적으로 제공하고 있으며 그 외 약물성 및 타약효시험 결과 등도 함께 제공 하고 있다. 2019년에는 신규과제 지원이 97건으로 증가하였으며 특히 산업체 활용건이 17건으로 확대되었다.

최근 4년간 화합물 활용 현황

년도	활용과제 건수		반출 횟수		반출화합물 개수	
	전체과제	신규과제	전체과제	신규과제	전체과제	신규과제
2016	239건	64건	411회	184회	1,236,527종	1,148,136종
2017	195건	62건	371회	137회	361,561종	181,032종
2018	188건	66건	297회	117회	253,514종	191,810종
2019	188건	97건	306회	185회	239,034종	206,980종

· 2019년 : 306회 걸쳐 총 239,034종 화합물 반출(평균 919여개/일), 유도체검색(의약화학) 지원 : 75회 (평균 1.5건/week 지원)

신규 약효시험 활용 현황 (2000~2019)



약효시험 활용현황 - 하반기 60건 (2019년 총 97건)

약효시험명	구분	적용질환
****에서 화합물을 이용한 cell viability assay	대학교	기타
**** 억제제 개발	연구기관	대사성질환
*** 활성 및 저해 화합물 개발	연구기관	항암제
*** inhibitor screening	대학교	항암제
*** 저해제 개발 연구	연구기관	항암제
*** 스크리닝	대학교	대사성질환
*** 제어 세균 단백질 유사화합물 발굴	대학교	감염증
*** 표적 저해제 발굴	연구기관	항암제
*** ligand 물질 선별	대학교	기타
*** 활성 억제 물질 탐색	대학교	기타
*** 저해	연구기관	항암제
*** 이중 활성 분석	연구기관	항암제
*** 억제물질 발굴	연구기관	바이러스
*** 억제 항암제	산업체	항암제
*** 저해제 약효평가	연구기관	항암제
*** 저해제 약효평가	연구기관	기타
*** 단백질에 대한 결합력 확인	연구기관	기타
*** 의 *** 형성 저해를 위한 화합물 개발	연구기관	감염증
*** 저해 유효물질 발굴	연구기관	항암제
*** 신호전달 조절제	산업체	항암제
*** 발현 화합물 스크리닝	대학교	대사성질환
*** 항균활성 물질 스크리닝	연구기관	기타
*** 저해제 선발	대학교	기타
*** 균 유래 *** 시스템을 타겟으로 하는 항생제 개발	대학교	감염증
*** 신호전달 시험	산업체	신경계
*** 저해제	연구기관	항암제
*** assay	산업체	항암제
*** 저해제	대학교	기타
*** 약효평가	연구기관	항암제
*** 결합 유무 시험	산업체	대사성질환

약효시험명	구분	적용질환
*** 저해능 시험	산업체	기타
*** 길항제 탐색	연구기관	감염증
*** antagonist 약효평가	연구기관	항암제
*** 억제제 발굴	대학교	항암제
***의 저해제 스크린	대학교	감염증
*** 저해제 스크리닝	대학교	항암제
*** 억제제	산업체	항암제
신규 HTS를 활용한 ***물질 발굴	연구기관	살충제
딥러닝을 활용한 *** 저해제 발굴	대학교	항암제
***의 ***에서의 항암효과 최적화	연구기관	항암제
*** 약효시험	대학교	항암제
*** 약물탐색	대학교	항암제
***의 ***유전자의 전사발현을 저해하는 화합물의 탐색	대학교	항생제
*** 유전자의 전사발현을 저해하는 화합물 탐색	대학교	항생제
*** 효소반응 억제 시험	산업체	항암제
*** 효소 저해제 검색	대학교	신경계
*** 활성제 탐색	연구기관	신경계
***세포 임상 기능강화를 위한 *** 및 ***물질 탐색	연구기관	면역
*** 유효물질 도출	대학교	항암제
*** 억제제 발굴	대학교	항암제
*** 에서 일차배양한 ***세포의 염증조절제 탐색	대학교	신경계
개량된 ***법을 이용한 *** 활성평가	연구기관	제초제
*** 저해제 스크리닝	대학교	항암제
*** 복합체에 대한 결합력 확인	연구기관	항암제
*** 발현 억제제 검색	연구기관	항암제
*** 연관 *** 세포의 ***억제제 발굴 연구	대학교	항암제
*** 에서의 *** 효과를 가지는 물질의 발굴	산업체	염증
*** 효소 활성물질 탐색	대학교	기타
*** 관련 *** 을 조절하는 화합물의 효능 평가	산업체	항암제
*** 바이러스의 *** 을 높일 수 있는 약물 탐색	산업체	기타

화합물 활용 논문 성과

2019년 21건. 한국화합물은행 제공 화합물 library를 활용하여 발표된 논문 목록

No	논문명	저자	저널
1	Identification of a novel SIRT7 inhibitor as anticancer drug candidate	Ji-Hye Kim, Da hee Kim, Suk Joon Cho, Kwan-Young Jung, Jong-Hoon Kim, Jun Mi Lee, Hee Jung Jung, Kwang Rok Kim*	*Biochemical and Biophysical Research Communications* **2019**, *508(2)*, 451-457
2	Homoharringtonine Induces Apoptosis in Human Colorectal Carcinoma HCT116 Cells Via Downregulation of Wnt/β-Catenin Signaling Cascade	Mikyung Park, Hojeong Kwon*, and Seong Hwan Kim*	*Bulletin of the Korean Chemical Society* **2019**, *40(2)*, 196-199
3	Stereoselective Synthesis of Highly Functionalized 5- and 6-Membered Aminocyclitols Starting with a Readily Available 2-Azetidinone	Raghavendra Achary, Hyeong Rae Kim, Hyeon-Kyu Lee*	*The Journal or Organic Chemistry* **2019**, *84(7)*, 4263-4272
4	DITMD-induced mitotic defects and apoptosis in tumor cells by blocking the polo-box domain-dependent functions of polo-like kinase 1	Ka-Ul Kim, Ju Hee Lee, Mi Young Lee, Chong Hak Chae, Jeong Hyun Lee, Byung Ho Lee, Kwang-Seok Oh*	*European Journal of Pharmacology* **2019**, *847*, 113-122
5	Small-molecule inhibitor of HlyU attenuates virulence of Vibrio species	Zee-Won Lee, Byoung Sik Kim, Kyung Ku Jang, Ye-Ji Bang, Suhyeon Kim, Nam-Chul Ha, Young Hyun Jung, Hyun Jik Lee, Ho Jae Han, Jong-Seo Kim, Jeesoo Kim, Pramod K. Sahu, Lak Shin Jeong, Myung Hee Kim & Sang Ho Choi*	*Scientific Reports* **2019**, *9*, 436-449
6	A nano sensor for sensitive and selective detection of Cu2+ based on fluorescein: Cell imaging and drinking water analysis	Prasad G.Mahajan, Nilam C.Dige, Balasaheb D.Vanjare, Seong-Hui Eo, Song Ja Kim, Ki Hwan Lee*	*Spectrochimica Acta Part A : Molecular and Biomolecular Spectroscopy* **2019**, *216*, 105-116
7	Discovery of Novel Pyruvate Dehydrogenase Kinase 4 Inhibitors for Potential Oral Treatment of Metabolic Diseases	Dahye Lee, Haushabhau S. Pagire, Suvarna H. Pagire, Eun Jung Bae, Mahesh Dighe, Minhee Kim, Kyu Myung Lee, Yoon Kyung Jang, Ashok Kumar Jaladi, Kwan-Young Jung, Eun Kyung Yoo, Hee Eon Gim, Seungmi Lee, Won-Il Choi, Young-In Chi, Jin Sook Song, Myung Ae Bae, Yong Hyun Jeon, Ga-Hyun Lee, Kwang-Hyeon Liu, Taeho Lee, Sungmi Park, Jae-Han Jeon, In-Kyu Lee*, and Jin Hee Ahn*	*Journal of Medicinal Chemistry* **2019**, *62(2)*, 575-588
8	Synthesis and Biological Evaluation of PF-543 Derivative Containing Aliphatic Side Chain	Seon Woong Kim, Taeho Lee, Yoon Sin Oh, Sang Mi Shin, Joo-Youn Lee, Sanghee Kim, Dong Jae Baek*, and Eun-Young Park*	*Chemical and Pharmaceutical Bulletin* **2019**, *67(6)*, 599-603
9	A Small Molecule Targeting Mutagenic Translesion Synthesis Improves Chemotherapy	Jessica L. Wojtaszek, Nimrat Chatterjee, Javaria Najeeb, Azucena Ramos, Minhee Lee, Ke Bian, Jenny Y. Xue, Benjamin A. Fenton, Hyeri Park, Deyu Li, Michael T. Hemann,* Jiyong Hong,* Graham C. Walker,* and Pei Zhou*	*Cell* **2019**, *178(1)*, 152-159
10	In vitro activity of DNF-3 against drug resistant Mycobacterium tuberculosis	Md Imtiazu Islam, Choi Moon Han, Hoonhee Seo, Sukyung Kim, Hafij Al Mahmud, Kung-Woo Nam, Byung-Eui Lee, Venkata S. Sadu, Kee-In Lee, Ho-Yeon Song*	*International Journal of Antimicrobial Agents* **2019**, *54(1)*, 69-74

No	논문명	저자	저널
11	Identification of new aryl hydrocarbon receptor (AhR) antagonists using live zebrafish model	Jieun Jeong, Kun-Hee Kim, Dong-Young Kim, Gopalakrishnan Chandrasekaran, Minhee Kim, Suvarna H. Pagire, Mahesh Dighe, Eun Young Choi, Su-Min Bak, Eun-Young Kim, Myung-Geun Shin*, Seok-Yong Choi*, Jin Hee Ahn*	*Bioorganic & Medicinal Chemistry* **2019**, *27(19)*, 115014
12	Facile synthesis of new quinazolinone benzamides as potent tyrosinase inhibitors: Comparative spectroscopic and molecular docking studies	Prasad G. Mahajan, Nilam C. Dige, Balasaheb D. Vanjare, Hussain Raza, Mubashir Hassan, Sung-Yum Seo**, Chong- Hyeak Kim, Ki Hwan Lee*	*Journal of Molecular Structure* **2019**, *1198*, 126915
13	Identification of a novel turn-on albumin binding small-molecule bioprobe in live zebrafish and its potential application in drug discovery	Hang-Suk Chun, Seo-Jung Han, Dae-Seop Shin, Haushabhau S.Pagire, Suvarna H.Pagire, Gwi BinLee, Chong Hak Chae, Boryeong Pak, Suk-Won Jin, Young-Tae Chang, Seung Bum Park, Jin Hee Ahn*, Myung Ae Bae**	*Dyes and Pigments* **2019**, *171*, 107720
14	The anti-biofilm and anti-virulence activities of trans-resveratrol and oxyresveratrol against uropathogenic Escherichia coli	Jin-Hyung Lee*, Yong-Guy Kim*, Chaitany Jayprakash Raorane, Shi Yong Ryu, Jae-Jin Shim & Jintae Lee*	*The Journal of Bioadhesion and Biofilm Research* **2019**, *35(7)*, 758-767
15	Discovery of small–molecule modulators of protein–RNA interactions by fluorescence intensity–based binding assay	Wan Gi Byun, Donghyun Lim, and Seung Bum Park*	*ChemBioChem - Wiley Online Library* **2019**, *20*, 1-8
16	Synthesis and biological evaluation of 3-acyl-2-phenylamino-1,4-dihydroquinolin-4(1H)-one derivatives as potential MERS-CoV inhibitors	Ji Hye Yoon, Jun Young Lee, Jihye Lee, Young Sup Shin, Sangeun Jeon, Dong Eon Kim, Jung Sun Min, Jong Hwan Song, Seungtaek Kim, Sunoh Kwon, Young-hee Jin, Min Seong Jang, Hyoung Rae Kim, Chul Min Park*	*Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* **2019**, *29(23)*, 126727
17	Fluoranthene-Induced Cytotoxicity and Direct Effect of Aryl Hydrocarbon Receptor Antagonist on Hematopoietic Stem Cell Differentiation	Seung-Hyun Yang, Min-Gu Kang, Hye-Ran Kim, Young Eun Lee, Bo Ram Na, Jun Hyung Lee, Jong-Hee Shin, and Myung-Geun Shin*	*Ann Lab Med* **2019**, *39(6)*, 580-583
18	Phenylethylamides derived from bacterial secondary metabolites specifically inhibit an insect serotonin receptor	Ariful Hasan, Hyun-Suk Yeom, Jaewook Ryu, Helge B. Bode & Yonggyun Kim*	*Scientific Reports* **2019**, *9*, 20358
19	Thiostrepton: A Novel Therapeutic Drug Candidate for Mycobacterium abscessus Infection	Tae Ho Kim, Bui Thi Bich Hanh, Guehye Kim, Da-Gyum Lee, June-Woo Park, So Eui Lee, Jae-Sung Kim, Byoung Soo Kim, Sungweon Ryoo, Eun-Kyeong Jo, and Jichan Jang*	*Molecules* **2019**, *24(24)*, 4511
20	Potential biomarkers and antagonists for fluoranthene-induced cellular toxicity of bone marrow derived mesenchymal stem cells	Md Moinul Hoque, Young Eun Lee, Hye Ran Kim, and Myung Geun Shin*	*Blood Research* **2019**, *54(4)*, 253-261
21	Discovery of (E)-5,5-Difluoro-1-[2-[5-(3-fluoroohenyl)pyridin-2-yl]vinyl]octahydrospiro(indene-2,5'-oxazolidin)-2'-one as a PAR1 antagonist	Chul Min Park, Sunkyung Lee*, Jong–Hwan Song , Joo–Youn Lee	*Bulletin of the Korean ChemicalSociety* **2019**, *40*, 658-667

데이터 플랫폼 구축

웹 기반 신약소재 화합물 DB 플랫폼 구축 현황

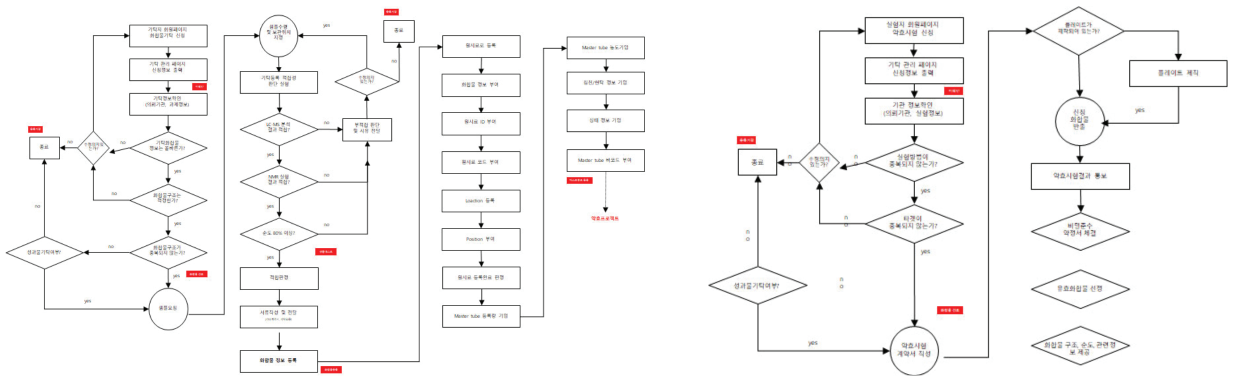
2019년 12월 한국화합물은행(이하 화합물은행)은 벤처기업인 ㈜파로스아이비티와 공동으로 웹 기반 신약소재 화합물 통합 데이터베이스 구축을 완료하여 시험 운행 중이며, 추가적으로 사용자 권한 설정 등의 보안시스템을 보완하여 2020년 하반기에 서비스를 제공 할 계획이다.

웹 기반 통합 데이터베이스(DB) 설계 및 구축

화합물은행은 1) 화합물 입고(기탁), 출고(활용), 보유량, 순도 분석 등의 정보를 관리하는 실물정보 데이터베이스(Plate Information Management System, PIMS), 2) 화합물은행이 보유한 64만종 이상의 화합물 구조와 약효 등의 화합물정보 데이터베이스(Compound Information Management System, CIMS), 그리고 3) ChEMBL, Protein Data Bank(PDB), DrugBank의 외부 공공데이터를 모아 하나의 통합 데이터베이스(DB) 시스템을 구축하였다. 외부 공공 데이터와 화합물은행 데이터는 화합물-타깃, 단백질-타깃, 질병-타깃 연결정보에 대한 분석을 통하여 통합 DB의 각 구성요소에 저장된다. 설계된 통합 DB 스키마 중에서 "전체화합물정보"를 기반으로 화합물은행 화합물, ChEMBL 화합물, DrugBank 화합물, 리간드 정보를 통한 PDB 단백질 정보, 화합물들의 molecular descriptor, 구조 검색용 fingerprints가 저장되며, 화합물-타깃-질병에 대한 메타데이터도 같이 분석 하여 DB 연결고리로 연결된 각 테이블 구성요소에 모두 저장된다. ChEMBL, PDB, DrugBank등의 외부 공공데이터는 주기적으로 자동 업데이트 기능이 작동하여 수집된다. 수집된 정보는 화합물의 기탁/분석/반출/활용 등과 같은 실무 정보와 연동될 수 있도록 데이터베이스가 설계되었다.

새로운 화합물은행 데이터베이스 플랫폼에서는 화합물 통합 검색 뿐만 아니라, 화합물 기탁, 화합물 및 데이터 활용 신청 등의 화합물은행의 전반적인 지원 서비스들이 온라인에서 가능하다. 화합물 기탁/활용과 관련된 실무 프로세스는 각 업무의 순서도와 새로 설계된 통합 DB에 연동된 웹 기반 인터페이스 서비스를 통하여 제공되며, 각 단계별 진행 절차에 따라서 입력된 정보들은 통합 DB에 저장된다.

기탁프로젝트 순서도 약효프로젝트 순서도

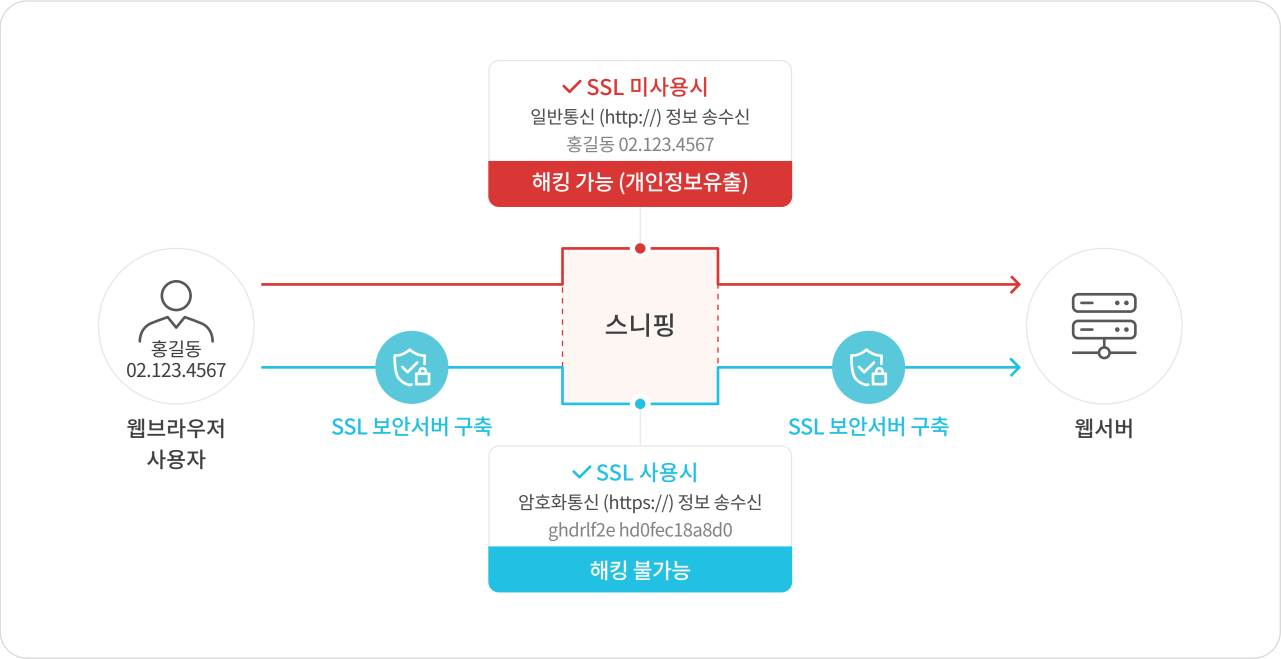


[그림 1] 화합물은행 기탁(좌) 및 약효(우) 프로젝트 등록 순서도

정보 보안 시스템

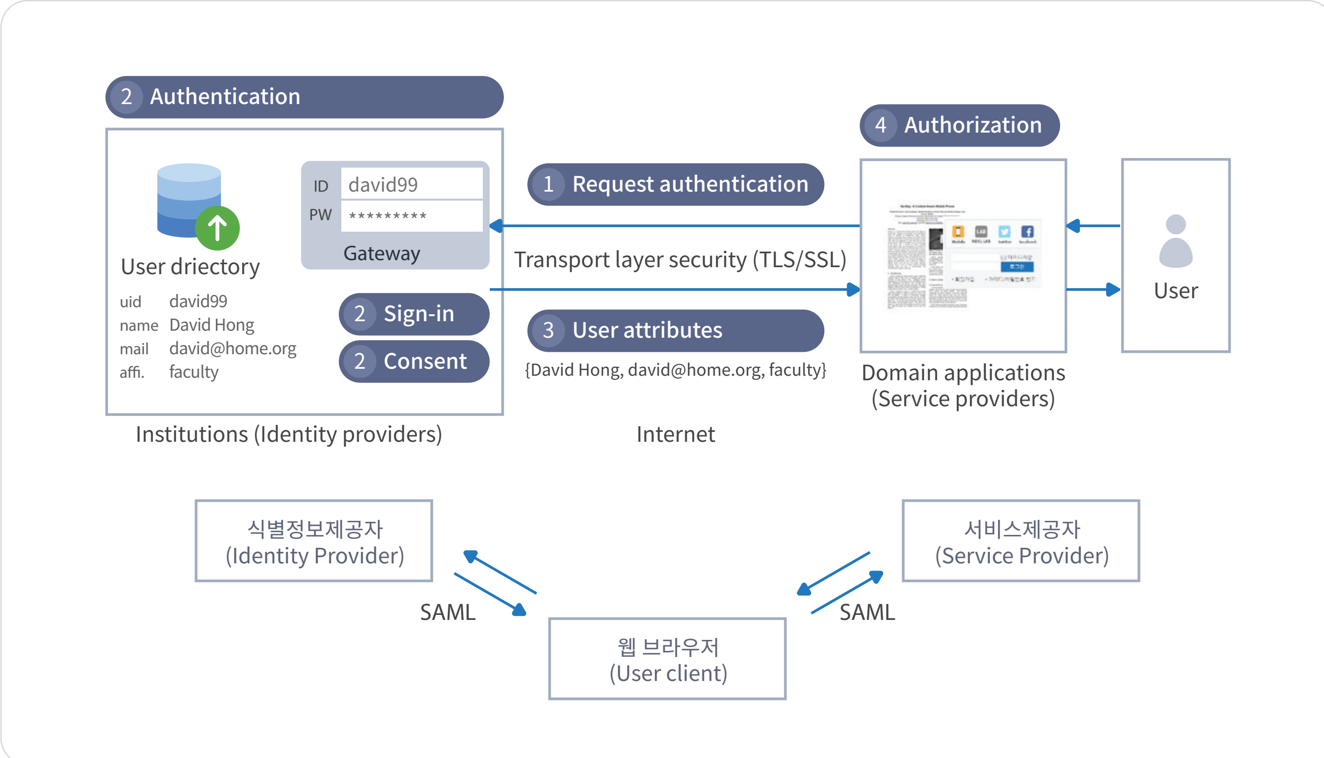
화합물은행 업무 서비스를 온라인에서 제공하기 위해서 로그인과 사용자 관리 시스템이 필요하며, 이에 따라 사용자 정보 보호 및 보안도 매우 중요하게 된다. 안전한 사용자 정보보호를 위해서 SSL 보안 인증서 필수 설치 및 NTIS(National Science & Technology Information Service) 연합인증 시스템을 적용하여 제공할 계획이다.

NTIS는 국가연구개발 사업에 대한 정보를 한 곳에서 서비스하는 국가과학기술 지식정보 포털 사이트로서, 국가 차원의 개인정보 보호 수준을 제공하여 사용자의 개인정보를 안전하게 보호한다. 화합물은행은 NTIS 연합인증 시스템을 이용하여 화합물은행 로그인 여부를 확인하고 사용자를 식별 할 것이다. 인터넷상에서 사용자 PC와 웹 서버 사이에 송수신되는 정보를 암호화하여 전송해주는 웹 서버를 보안서버라고 한다. 보안이 적용된 웹 사이트에서는 사용자가 입력한 화합물 구조나 구조 검색 결과 등 웹사이트를 통해 오가는 모든 정보가 암호화되기 때문에 중간에서 누군가 해당 정보를 가로채도 이를 알아낼 수 없게 된다. NTIS 연합인증 시스템은 필수적으로 보안서버를 지원하기 때문에, SSL 보안 인증서 설치는 반드시 필요하다.



[그림 2] SSL 보안서버의 예시

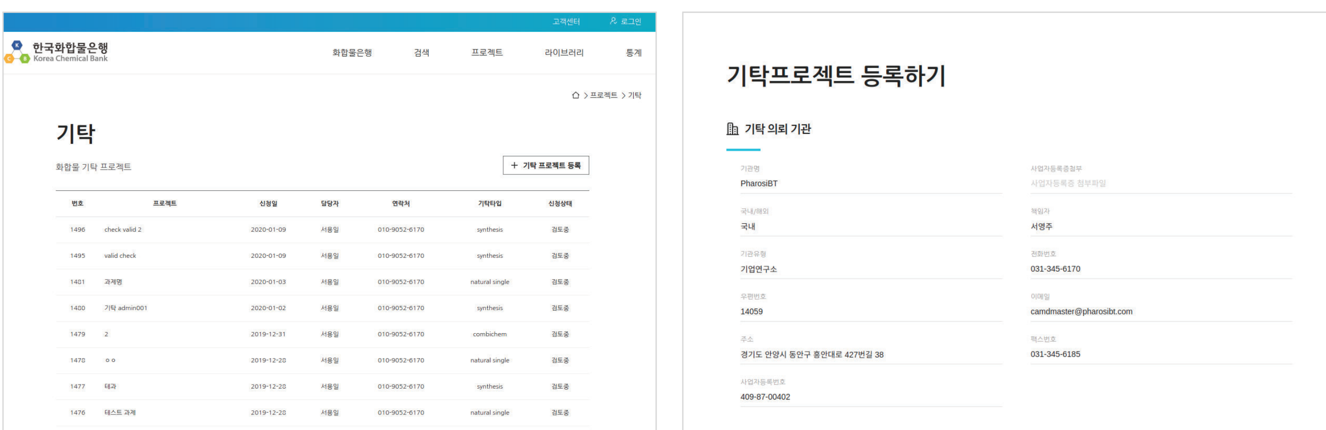
새로운 통합 데이터베이스 관리/운영 시스템은 다수 사용자의 안정적인 운영을 위하여 Java 기반의 Spring Boot 2.2 웹 프레임워크를 토대로 개발되었으며, 사용자 친화적인 웹 인터페이스를 제공하기 위하여 Vue 자바스크립트 라이브러리를 이용한 최신 front-end 디자인이 적용되었다. NTIS 연합인증 시스템은 Spring의 SAML(Security Assertion Markup Language) 모듈을 이용하여 제공될 것이다. 화합물은행 통합 데이터베이스 플랫폼에서 로그인 기능을 요청하면 HTTP-Redirect 기능이 작동하여 NTIS 로그인 창이 생성된다. 생성된 로그인 창에서 사용자의 NTIS 계정으로 로그인하게 되면, 화합물은행 서버와 NTIS 인증 서버와 통신하여 사용자 로그인 정보를 식별하게 된다. 이렇게 로그인에 성공한 사용자들은 화합물은행의 새로운 온라인 기능들을 사용할 수 있게 된다.



[그림 3] NTIS 연합인증 시스템 개요

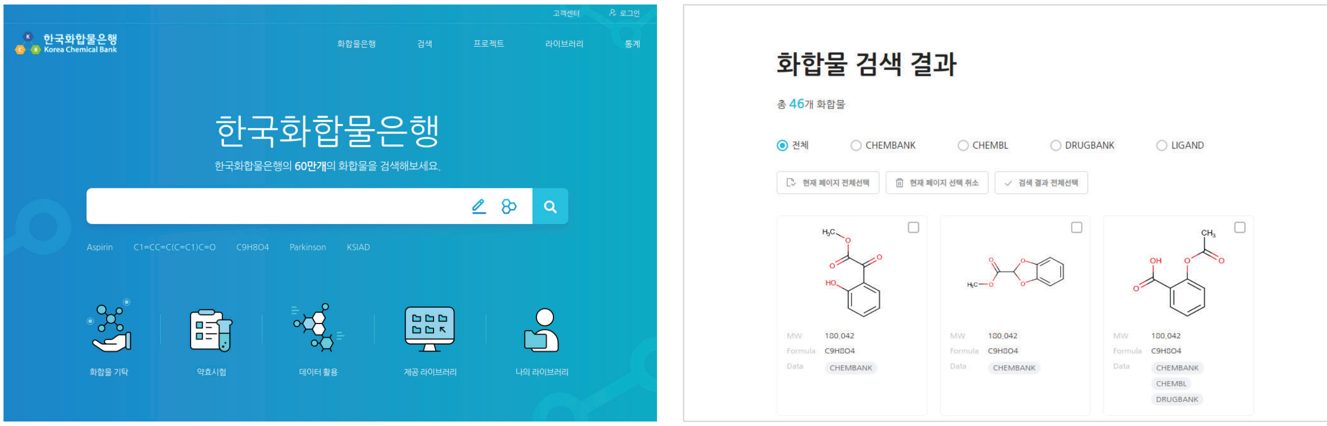
웹 기반 서비스 계획

화합물은행 통합 DB 플랫폼의 온라인 기능들은 화합물 기탁 및 반출, 반출된 화합물의 약효시험 데이터 등록 및 정보검색이 있다. 화합물 기탁은 사용자 로그인 후에 "프로젝트 > 기탁" 메뉴에서 기탁 프로젝트 등록 기능을 통하여 가능하다. 기탁에 필요한 정보들을 사용자가 입력 후, 화합물 구조 파일인 mol 또는 sdf 파일을 업로드 하면 기탁 신청 과정이 진행된다.



[그림 4] 기탁프로젝트 온라인 신청 예시

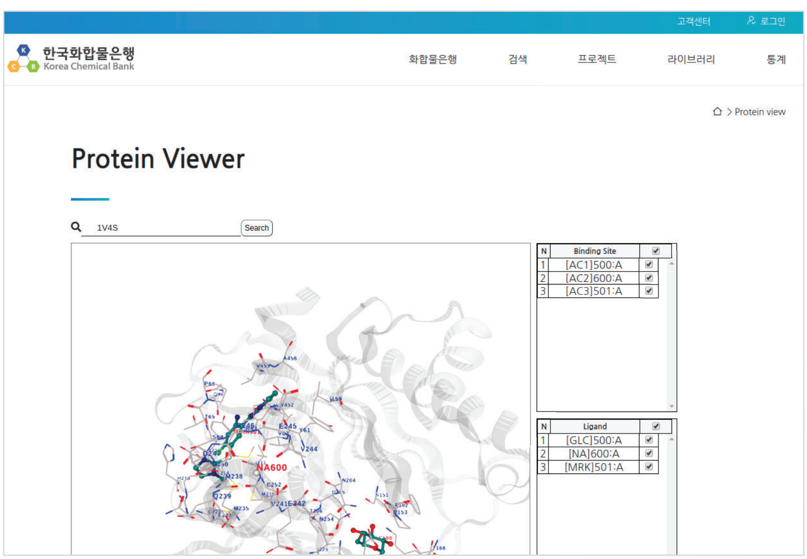
화합물 반출 신청은 화합물은행이 미리 만들어 둔 목적형 라이브러리(Focused library) set인 “제공 라이브러리”나 사용자가 본인의 활용 목적에 맞추어 구성한 “나의 라이브러리”를 이용하여 가능하다. “제공 라이브러리”에는 대표, 임상, 천연물, PPI, GPCR, Kinase, Fragment 라이브러리 등이 있으며, 사용자가 화합물 검색을 통하여 화합물을 선별하고 “나의 라이브러리”에 원하는 화합물 리스트를 구성하여 반출 신청을 진행할 수 있다.



[그림 5] KCB 통합 DB 플랫폼의 메인 페이지(좌), 화합물 검색 결과(우)

화합물 검색은 메인 화면에서 쉽게 접근할 수 있으며, “검색>화합물 검색” 메뉴에서도 검색이 가능하다. 먼저 1차 검색 결과에서는 통합 DB에 있는 화합물 구조와 화합물 구조의 출처를 확인할 수 있다. 검색된 화합물 구조 결과는 “전체”, “CHEMBANK”, “ChEMBL”, “DRUGBANK”, “LIGAND”로 구분되며, 각 분자 구조를 보여주는 화합물 카드에는 해당 화합물이 어느 카테고리에 해당되는지 확인이 가능하다. 화합물은행 반출을 신청하기 위해서는 “CHEMBANK” 카테고리를 선택하여 원하는 화합물을 선별할 수 있다. 또한 검색된 분자의 구조를 클릭하게 되면, 다양한 물성정보(분자량, 분자식, logP, H-bond donors/acceptors, Polar surface area 등)뿐 아니라, 이와 관련된 질병, 타깃, 단백질 구조 정보도 볼 수 있다.

현재 소개된 화합물은행 신약 소재 통합 DB 플랫폼은 2020년 하반기 정식 서비스를 제공할 계획으로, 현재 로그인 연동 작업 및 각 기능들의 테스트 검증 단계에 있다.



[그림 6] KCB 통합 DB 플랫폼의 단백질 구조 Viewer

[기고문] 한국화합물은행 데이터 활용 사례

빅데이터·인공지능 기반 신약개발 연구

광주과학기술원 전기전자컴퓨터공학부
남호정

지난해 6월 착수한 빅데이터·인공지능 기반 신약개발 플랫폼 구축 사업(과학기술정보통신부/바이오·의료기술 개발사업, 2018.06.01.~2019.12.31.) 연구 결과물인 신약 개발 플랫폼을 개발하였다 (그림 1). 해당 플랫폼의 보유 정보 및 제공 기능들에 대한 소개를 본 지면을 빌려 다뤄 보려한다.

한국화학연구원, 한국화합물은행, 광주과학기술원, 경상대학교 연구진들이 공동으로 개발한 이 플랫폼은 화합물에 대한 효능, 약물성, 독성 등 주요 연구데이터를 포함한 정형화된 관계형 데이터베이스를 기반으로 하며, 기계학습 및 인공신경망 기술 등을 접목하여 화합물 정보, 약물-표적 상호작용 예측, 약물동태·독성 예측 등의 인공지능 서비스를 제공한다.

우선 한국화학연구원은(연구책임자 김동욱 책임) 국가 연구개발사업을 통해 한국화합물은행에 축적된 연구 데이터와 국내외 데이터베이스 등을 활용한 화합물 빅데이터 플랫폼을 구축하였다. 해당 플랫폼에는 15만종의 한국화합물은행 공개 화합물 기본 정보와 활성 실험 정보를 제공한다 (그림 2).

[그림 1] 빅데이터 · 인공지능 기반 신약개발 플랫폼

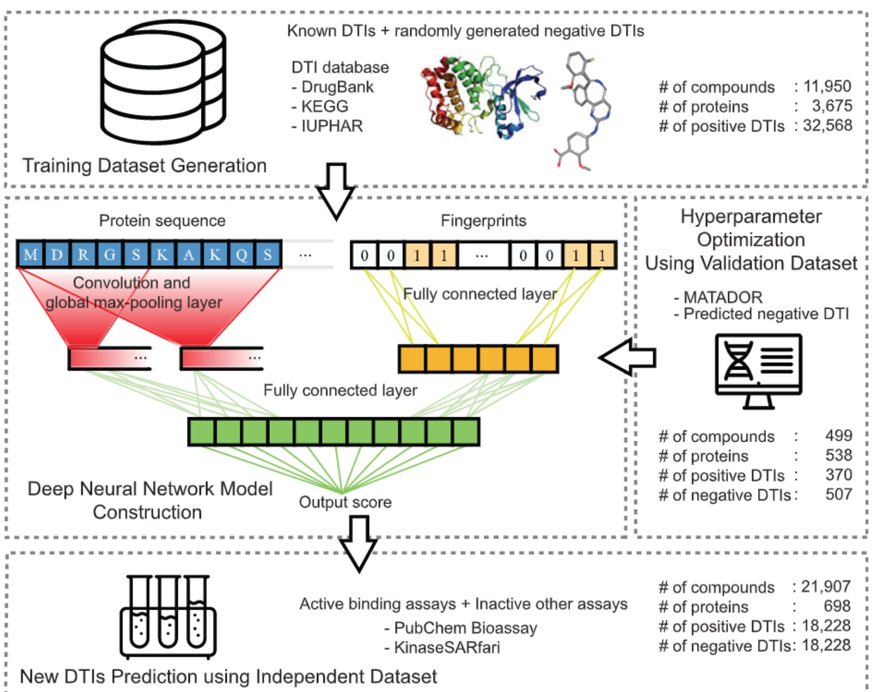
Assays

130-assays with 1,088,007-activity data in KCB DB

Name	Target	Assay class	Num data	Activities	Profile
acetolactate synthase (ALS)	CHEMBL4263	enzyme-etc	2868	0 ~ 74	
Cell-based Sodium hydrogen exchanger-1 (NHE-1) 억제제	CHEMBL2781	etc	34217	-443 ~ 89	
식물 Glycolate Oxidase(GO) 저해제 검색	CHEMBL4229	enzyme-etc	3924	0 ~ 53	
Cinnamyl Alcohol Dehydrogenase inhibitor		enzyme-etc	49077	-313 ~ 99	
p53 세포 신호전달계 regulator	CHEMBL1907611	cell based assay	13541	-95 ~ 319	
KAPAS inhibitor		enzyme-etc	8	0 ~ 98	
Hypoxia 신호 전달계 regulator	CHEMBL2216741	cell based assay	11178	-126 ~ 220	

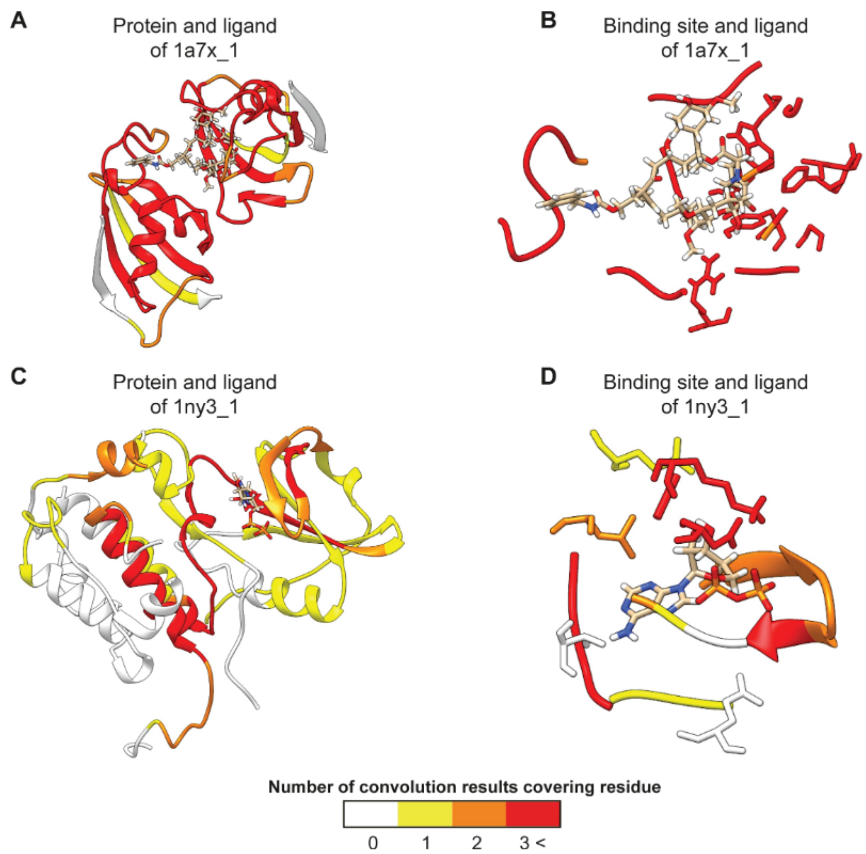
[그림 2] 한국화합물은행 기탁화합물 활성정보

광주과학기술원(연구책임자 남호정 교수) 연구진이 개발한 **약물-표적 단백질 상호작용*** 예측 기술은 화합물(약물) 및 단백질(표적) 정보를 기반으로 화합물-단백질 간 상호작용을 학습하며, 이를 통해 질병을 유발하는 단백질을 제어하는 화합물 구조를 예측하는 등 신약 후보물질을 발굴하는 예측모델이다 (그림 3).



[그림 3] 약물-표적 단백질 상호작용 판별 인공지능 모델 개요

* 약물-표적 단백질 상호작용: 표적 단백질이 주어진 약물과 실제 결합하는지 여부



[그림 4] 단백질 FKBP12과 MAPKAPK2 상에서의 합성곱 신경망 결과를 해석한 결과,
화합물의 결합 지역이 그 외 지역보다 강조됨을 확인할 수 있었다.

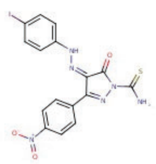
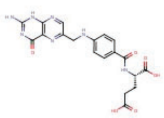
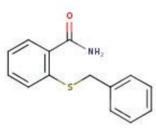
해당 예측 모델은 기존에 실험적으로 수행되던 약물-표적 단백질 상호작용 판별을 합성곱 신경망(Convolutional neural network) 인공지능 모델을 이용하여 진행한다. 해당 인공지능 모델은 합성곱 신경망을 사용하여 약물과 상호작용하는 단백질의 주요 지역 서열 패턴을 추출하고, 이를 약물-표적 단백질 상호작용의 예측에 이용하였다. 24,000개 이상의 약물-표적 단백질 데이터를 시험한 결과 약 80%의 정확도를 보여주었다. 또한, 합성곱 신경망의 결과를 해석하여 추출된 지역 서열 패턴이 실제로 약물-표적 단백질 상호작용에 관련하는 부분임을 확인할 수 있었다 (그림 4).

약물 개발의 초기 단계에서 질병에 관여한다고 생각되는 표적 단백질이 선정된 후, 표적 단백질과 상호작용하는 화합물을 선별하게 된다. 실험적으로 수행되는 약물-표적 단백질 상호작용의 판별은 많은 시간과 비용을 소모한다. 또한, 실험적인 약물-표적 단백질 상호작용의 판별은 주어진 **화합물 라이브러리***내에서 무작위 화합물에 대하여 수행되기 때문에 실제 상호작용하는 화합물이 선별되는 비율은 매우 낮은 편이다. 현재 남호정 교수와 과학기술정보통신부 '인공지능 기반 신약개발 플랫폼 구축' 과제를 공동으로 수행하고 있는 GIST 생명과학부 김용철 교수와 GIST 화학과 안진희 교수는 한국화합물은행 공개 화합물 15만종에 대하여 해당 인공지능 모델을 이용한 스크리닝 실험을 수행하였으며, 그 결과 키나아제(kinase), 이온 통로(ion channel), G-단백질 결합 수용체(G-protein coupled receptor, GPCR) 등의 단백질 군에서의 **hit***의 비율이 10~20배의 상승하는 효과를 확인하였다.

* 화합물 라이브러리: 약물개발 중 초기 화합물 선별과정에서 사용되는 화합물 세트
* hit: 대단위 스크리닝 기법 중 초기 활성 물질

이러한 약물-표적 단백질 상호작용은 한국화합물은행 공개 화합물 15만건을 대상으로 예측이 진행된다. 우선 해당 예측 서비스를 사용하기 위하여 사용자는 표적 단백질 정보를 Uniprot 단백질 ID로 입력한다. 표적 단백질에 대한 ID는 예측 시스템 내에서 기 보유하고 있는 단백질의 아미노산 서열정보로 변환되며 해당 단백질 서열과 상호작용할 것으로 예측되는 상위 50개의 화합물 정보를 얻을 수 있다 (그림 5).

또한 경상대학교-이화여자대학교(연구책임자 경상대학교 이근우 교수) 연구진의 약물동태·독성 예측 플랫폼은 화합물의 인체 내 흡수, 분포, 대사, 배출 등의 약물동태 정보를 학습하며, 이를 통해 알려진 표적에 대해 흡수·배출이 잘 되고 독성이 낮은 화합물 구조를 예측하는 서비스를 제공한다.

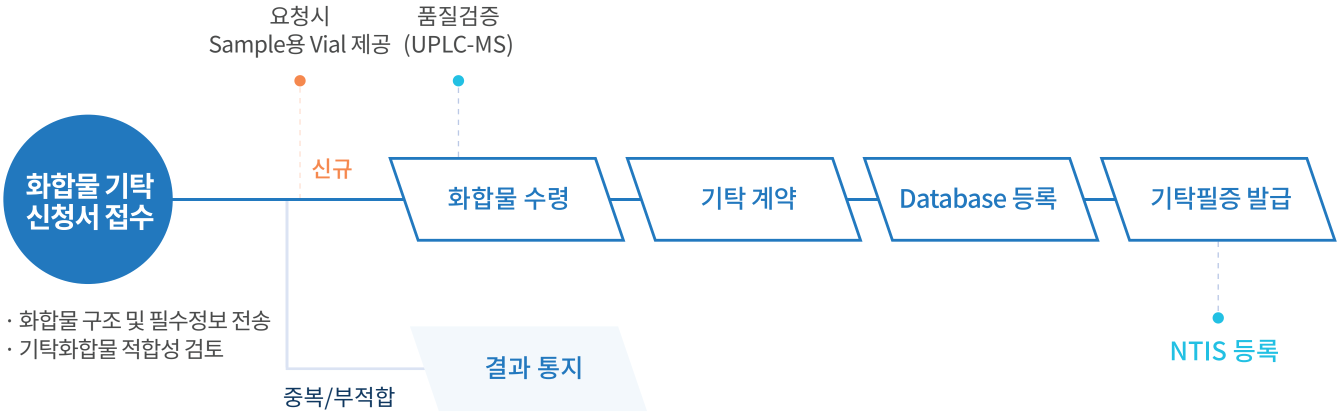
Rank	Compound	SMILES	Predicted score
0		NC(=O)CCC(N)C(=O)O	0.9654864072799683
1		NC(=S)N1N=C(c2ccc([N+](=O)[O-])cc2)/C(=N/Nc2ccc(I)cc2)C1=O	0.9606618285179138
2		Nc1nc(=O)c2nc(CNc3ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)cc3)cnc2[nH]1	0.9554084539413452
3		NC(=O)c1ccccc1SCc1ccccc1	0.9514275789260864

[그림 5] Carboxypeptidase B2 단백질과 상호작용할 것으로 예측된 화합물 정보

이번에 공개된 빅데이터·인공지능 기반 신약개발 플랫폼은 순수 국내 연구진들의 연구 결과물들을 기반으로 구축된 플랫폼으로 국내 제약산업 기반 기술력 제고에 활용될 수 있기를 기대한다. 국가연구개발 사업으로부터 기탁된 화합물 정보와 국가연구개발 사업으로 개발된 인공지능 기술이 통합된 이 플랫폼은 개별 연구 결과물 공유 및 통합이 이끌 수 있는 최고의 시너지를 보여준 좋은 예라 할 수 있다. 연구진들은 각자의 연구 결과물을 공개하고 그것으로부터 더 다양한 예측 결과를 얻을 수 있는 구조이다. AI기반 초기약물 후보 예측은 몇 년안에 실제 거대 제약회사들의 파이프라인에서 사용될 전망이다. 국내 제약 관련 업체 및 연구소들도 이러한 움직임에 발빠르게 대처할 수 있는 요소 기술을 본 플랫폼을 활용하여 구축하길 바라며 본 기고문을 마무리 하겠다.

화합물 기탁 절차

문의 **E-mail.** chembank@krict.re.kr **Tel.** 042-860-7190 **Web.** www.chembank.org



기탁화합물 범위 및 기준

I 범위 유기합성 화합물 및 단일성분 천연물
(기탁화합물의 활성여부와 상관 없음. 최종 화합물 뿐만 아니라 합성 중간체도 기탁 가능)

I 품질기준 화합물 양 >10mg(권장), 순도 >80%(한국화합물은행에서 UPLC-MS로 검증),
구조를 확인할 수 있는 NMR 자료 제출

기탁자 혜택

- **기탁화합물에 대한 활용 결과 도출시 그 결과를 통보 받을 수 있다.**
- **기탁화합물의 활용결과 Hit이 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

보유 화합물 품질관리

Ⅰ 제공화합물의 품질관리가 활용자들의 실험결과에 큰 영향을 미칠 수 있으므로 한국화합물은행에서는 보유 화합물의 품질을 최상으로 유지하기 위하여 노력하고 있다.

Ⅰ 장기 보관에 따른 화합물의 품질 저하를 최소화하기 위하여 원시료(순수) 화합물은 -5 °C 저온창고에 보관하며, 반출 요청에 신속하게 대응하기 위하여 소량의 화합물을 DMSO에 녹인 마스터 튜브(5 mM)를 제작하여 -20 °C에 보관하고 있다.

반입, 보관, 반출 단계별 화합물 품질 관리

1) 반입 화합물 품질 관리

반입되는 모든 화합물은 UPLC-MS 분석을 통하여 분자량 및 순도를 확인하고 있으며, UPLC-MS 분석으로 분자량 확인이 되지 않거나 순도가 80% 이하인 화합물은 화합물과 함께 제출된 ^{1}H-NMR 자료를 검토하여 화합물 구조 및 순도(80% 이상)가 확인되는 화합물만 기탁받고 있다.

2) 보관 화합물 품질관리

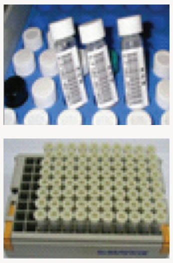
화합물을 장기 보관함에 따라 필연적으로 생길 수 있는 화합물의 품질 저하를 체크하기 위하여 매년 보유 화합물의 일부(약 20,000종)를 선별하여 UPLC-MS로 품질 검증을 하고 있으며 순도가 80% 이하인 화합물은 반출을 중지하고 별도로 관리하고 있다.

3) 반출 화합물 품질관리

화합물이 반출된 후 약효시험을 거쳐 Hit 화합물로 확인된 경우, 다음 단계의 실험을 진행하기 전에 Hit 화합물의 품질을 UPLC-MS로 다시 분석하여 그 결과를 활용자와 기탁자에게 제공하고 있다.

Cold room (−5 ℃)

Auto−storage (−20 ℃)
(Brooks SS−II)



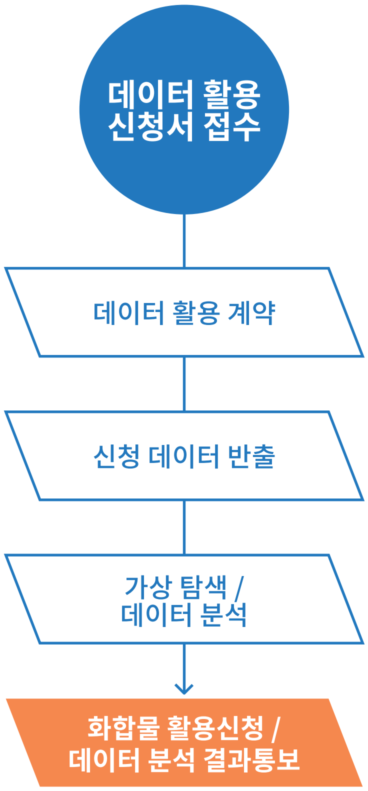
Barcoded
tubes

UPLC−MS
Waters Acquity UPLS−SQD2

Ⅰ 한국화합물은행은 보유 화합물의 품질을 최상으로 유지하기 위하여 노력하고 있습니다.

데이터 활용 절차

문의 **E-mail.** chembank@krict.re.kr **Tel.** 042-860-7190 **Web.** www.chembank.org



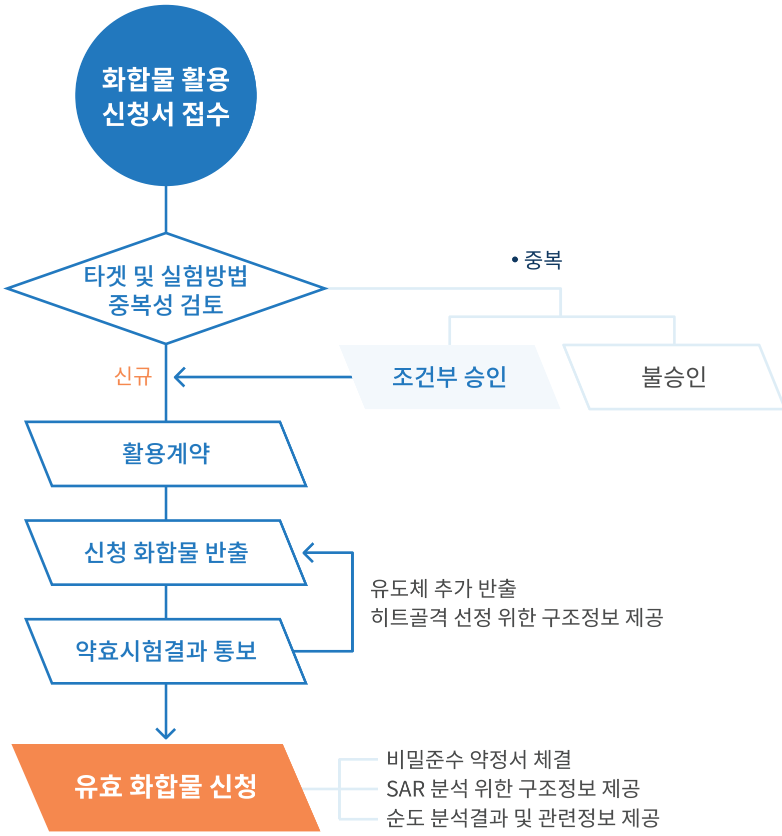
정보제공 데이터 종류

<table>
<tr><th>분류</th><th colspan="2">소분류</th></tr>
<tr><td rowspan="5">화합물 구조 정보</td><td colspan="2">구매화합물 라이브러리</td></tr>
<tr><td rowspan="3">Focused 라이브러리</td><td>임상 화합물</td></tr>
<tr><td>GPCR 화합물</td></tr>
<tr><td>PPI 화합물</td></tr>
<tr><td colspan="2">반출 가능한 라이브러리</td></tr>
<tr><td>약효시험결과 정보</td><td colspan="2">공개 가능한 정보</td></tr>
</table>

· 데이터 정보는 USB로 제공됩니다.
· 데이터 활용 계약의 종료 시, **반드시 데이터의 폐기 및 해당 USB를 반납하셔야 합니다.**

화합물 활용 절차

문의 **E-mail.** chembank@krict.re.kr **Tel.** 042-860-7190 **Web.** www.chembank.org



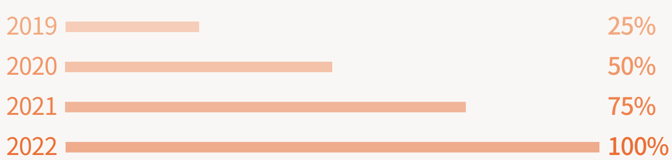
화합물 사용료 규정

- 화합물은 무상으로 제공합니다.
- 화합물 제공에 수반되는 실비용(plate, 분주기 tip, 튜브 cap, 택배 비용 등)은 사용자 부담합니다.(2019년 1월부터 부과)
- 중소 / 벤처 / 대학교 / 연구원은 실비의 50%만 활용자가 부담합니다.

화합물 반출실비 부과

한국화합물은행 단계적 화합물 반출 실비 부과 계획(2019년 1월 시행)

- 2019년 1월1일 부터 실비의 25% 활용자 부담
- **2020년 1월1일 부터 실비의 50% 활용자 부담**
- 2021년 1월1일 부터 실비의 75% 활용자 부담
- 2022년 1월1일 부터 실비의 100% 활용자 부담



2020년 기준

* 부가세 별도

Plate 종류	Plate 개수	단가	대기업 / 중견기업	중소 / 벤처 / 대학교 / 연구원
96-well (80종 / 1Plate)	1	23,300원	11,600원	5,800원
384-well (320종 / 1Plate)	1	89,300원	44,600원	22,300원

- 대표화합물(6,948종) 중소 / 벤처 / 대학교 / 연구원 기준
- 96-well : 504,600원 / 384-well : 490,600원

한국화합물은행 제공 화합물의 활용결과 (논문, 특허 등)에 대한 권리관계 규정

규정목적

· 한국화합물은행은 기탁자들이 기탁한 화합물을 바탕으로 운영되고 있습니다.
· 기탁자들의 화합물 기탁을 장려하기 위하여 기탁자들에게 최소한의 혜택을 드리며, 동시에 화합물 사용자들의 불편함을 최소화하기 위하여, 한국화합물은행이 제공한 화합물을 활용하여 도출된 연구결과(논문, 특허 등)의 권리관계에 대하여 아래와 같은 규정을 적용합니다.

규정내용

· **활용결과(논문, 특허 등) 권리관계 규정 내용**

1. 기탁자가 단순기탁 이외의 추가적인 기여가 없는 경우에는 화합물 기탁자로서 논문의 사사(acknowledgement) 에 표기하는 것이 **"원칙"**입니다.
2. 기탁자가 추가적인 기여(유도체 합성 제공, 관련 정보제공 등)을 하였을 경우에는 기여정도에 따라 기탁자를 논문 공저자 및 특허 공동발명인(공동출원인)으로 **"포함"**을 장려합니다.
3. 기탁자의 추가적인 기여가 없으며 기탁자가 **"물질특허"**가 있는 경우, 활용결과에 대한 **"용도특허"**는 사용자(발견자)에게 귀속되며 **"물질특허"**에 관해서는 기탁자와 협의하여야 합니다.
4. 기탁자의 추가적인 기여가 없으며 기탁자가 **"물질특허"**가 없는 경우, 사용자(발견자)가 "**물질특허**"를 취득할 수 있으나, 기탁자에게 사전 공지와 협의가 필요할 것입니다.

* 모든 논문 및 학회 발표에는 한국화합물은행 제공 화합물을 사용하여 연구가 진행되었다는 사사(acknowledgement)를 포함하여야 합니다.

> 한국화합물은행 활용결과의 권리 규정은
> 과학계에서 등용되는 연구결과 기여도에 대한 **"연구윤리 기본원칙"**을 따르고 있습니다.

후속연구를 위한 화합물 추가합성 및 구매 진행 안내

1. 한국화합물은행의 역할은 활용자의 요청에 따라 primary screening에 필요한 화합물을 제공하고 활성을 보이는 경우, 해당 화합물의 구조와 관련정보를 보내드리는 것 입니다. 한국화합물은행은 소량의 화합물만 기탁 받아서 보유하고 있기 때문에 확인 실험에 필요한 정도의 화합물 양까지는 제공할 수 있지만 진전단계(*in vivo* 실험 및 약물성/독성 시험 등)의 실험에 지원할 정도의 화합물 양은 서비스하고 있지 않습니다.

2. 진전단계의 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) 합성전문가를 물색하여 공동연구 진행

3. 한국화합물은행(KCB) 활용 화합물 중에서 상용 화합물의 구매를 원하시는 경우, KCB는 구매 가능한 vendor 정보만 제공해 드립니다. 개정된 화관법, 화평법 규정이 강화되고 있으므로, **화학물질의 해외 구매 시 신고 및 등록 의무를 사전에 반드시 확인**바랍니다. (화학물질정보처리시스템, https://kreachportal.me.go.kr)

한국화합물은행 제공 라이브러리 종류

전체 Library

화합물 수 : 64만종

· 대표 Library

- 화합물 수 7,000
- 라이브러리 구성 전체 화합물을 대표하는 라이브러리, 순도 및 분자량 검증 (UPLC-MS), Eye filtering

· Kinase Library

- 화합물 수 3,000
- 라이브러리 구성 Kinase active site에 결합 가능성이 높은 화합물을 분자모델링 방법(docking) 으로 선별하여 구성

· 임상화합물 Library

- 화합물 수 2,000
- 라이브러리 구성 임상 I - III 상 단계 화합물 및 승인 약물 (Clinically applied compounds)

· 천연물 Library

- 화합물 수 1,000
- 라이브러리 구성 단일성분 천연물 및 천연물 유사골격 (Natural product like) 구조의 화합물

· PPI Library

- 화합물 수 17,000
- 라이브러리 구성 해외 vendor로 부터 선별 구매화합물

· Fragment Library

- 화합물 수 1,000
- 라이브러리 구성 분자량 300이하 화합물 라이브러리, Rule of 3 filtering (20 mM in DMSO)

· GPCR Library

- 화합물 수 10,000
- 라이브러리 구성 해외 vendor로 부터 선별 구매화합물

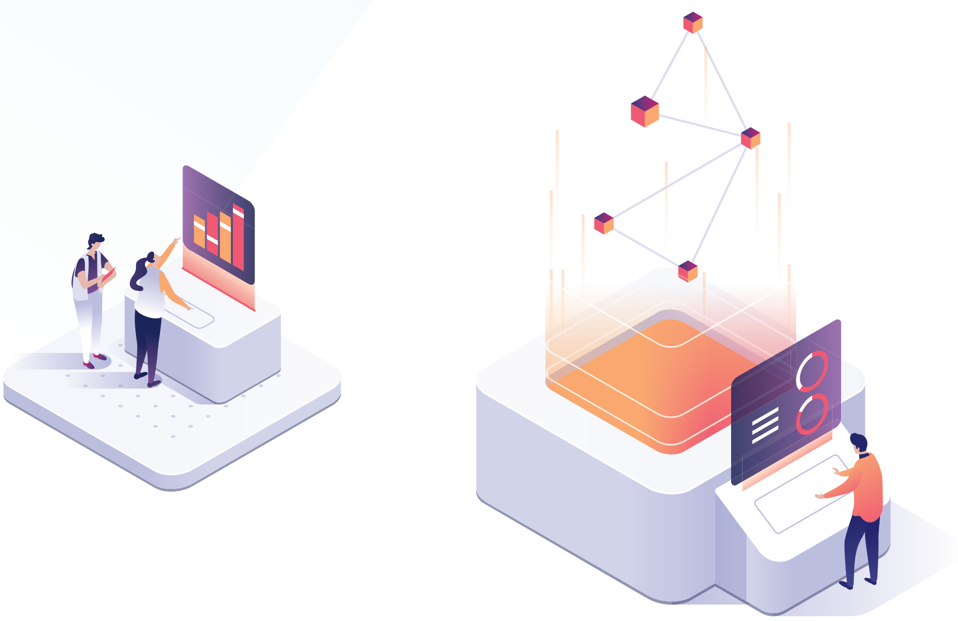
· PharmaCore Collection

- 화합물 수 요청개수
- 라이브러리 구성 요청골격 또는 분자모델링 방법을 적용한 수요자 맞춤형 선별 화합물

· 기본 제공량 : 5 uL (DMSO 용액, 평균농도 5 mM)

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
- 주소 : 대전광역시 유성구 가정로 141 한국화학연구원 한국화합물은행 E2연구동 (우.34114)
- 전화(대표) : 042-860-7190 / 팩스 : 042-860-7096 / E-mail : chembank@krict.re.kr

이름	담당업무	전화	E-mail
이선경	사업책임자	042-860-7148	leesk@krict.re.kr
이현규	의약화학	042-860-7016	leehk@krict.re.kr
이윤호	분자모델링	042-860-7453	yunolee1@krict.re.kr
강영묵	화합물은행DB	042-860-7015	ymkang@krict.re.kr
황순희	대외협력	042-860-7190	chembank@krict.re.kr
김선우	화합물관리	042-860-7171	swkim@krict.re.kr
김선호	화합물관리	042-860-7090	shkim@krict.re.kr
이유리	화합물정보	042-860-7092	yurilee@krict.re.kr
이수연	LC-MS, 물성분석	042-860-7747	suyoun@krict.re.kr
박희정	LC-MS, 물성분석	042-860-7070	huijeong@krict.re.kr

신약소재 화합물 및 데이터 공동활용 플랫폼!

한국화합물은행은 현재 보유하고 있는 64만종 이상(2019년)의 신약소재 화합물을
산·학·연 연구자에게 제공하여 신약개발 및 바이오 연구를 지원하며,
Hit 화합물을 매개로 하여 기탁자와 활용자의 공동연구를 중개하고 있습니다.

과학기술정보통신부 지정
연구성과 관리·유통 전담기관
- 화합물 전담기관 -

한국화합물은행은 국가연구개발사업 수행을 통해 창출된 연구성과 중 화합물 및 관련 정보의 관리·유통 전담 기관으로 지정되어 있습니다.
[과학기술정보통신부 고시 제2019-58호]

Vol.1
KCB newsletter
한국화합물은행 뉴스레터
2020년 제1호

한국화합물은행
Korea Chemical Bank

대전광역시 유성구 가정로 141 한국화학연구원 한국화합물은행 (우. 34114)
Tel. 042-860-7190 **Fax.** 042-860-7096 **E-mail.** chembank@krict.re.kr **Web.** www.chembank.org