

화합물 활용 가이드북

2020

한국화합물은행

[34114]

대전광역시 유성구 가정로 141

한국화학연구원 한국화합물은행

Tel : 042-860-7190

Fax : 042-860-7096

E-Mail : chembank@krikt.re.kr

Homepage : <http://www.chembank.org>

[한국화합물은행 제공 라이브러리 현황]

라이브러리 종류	화합물수	농도(평균)	설 명
전체 Library	640,000	5 mM, 5 uL	전체 화합물 라이브러리
대표 Library	7,000	5 mM, 5 uL	전체 화합물을 대표하는 라이브러리, 순도 및 분자량 검증(LC/MS)
Kinase Library	3,000	5 mM, 5 uL	분자모델링 방법(docking)을 적용하여 kinase 타겟 대상 active site에 결합할 가능성이 높은 화합물
임상화합물 Library	2,150	5 mM, 5 uL	임상 I-III상 단계 화합물 및 승인 약물(clinically active compounds)
Fragment Library	1,000	20 mM, 5 uL	분자량 300이하 라이브러리, 순도 및 분자량 검증(LC/MS)
천연물 Library	1,000	5 mM, 5 uL	단일성분 천연물 및 천연물 유사골격(natural product-like) 구조의 화합물
GPCR Library	10,000	5 mM, 5 uL	해외 vendor로부터 선별 구매화합물
PPI Library	17,000	5 mM, 5 uL	해외 vendor로부터 선별 구매화합물
PharmaCore Collection	요청개수	5 mM, 5 uL	요청골격으로 선별한 화합물 또는 가상탐색으로 선별한 화합물

■ 대표 Library

- 한국화합물은행이 보유하고 있는 총 64만종의 화합물을 대표할 수 있는 1차 시험용 라이브러리
- 골격의 다양성과 대표성을 고려하고 'Rule of 5' 등 약물성과 의약화학적 선별과정을 거침
- LC/MS를 통한 분자량과 순도를 검증

■ Kinase Library

- 한국화합물은행 보유 전체 라이브러리 및 구매 가능 라이브러리를 대상으로 분자모델링 방법(docking)을 적용하여 kinase 타겟의 active site에 결합할 가능성이 높은 화합물로 구성

■ 임상화합물 Library

- 임상 I-III상 단계 화합물 및 시판승인 약물
- 구조 중복성 검토하여 clinical collection 구축 (NIH Clinical Collection, Microsource Spectrum Collection, Prestwick Chemical Library®, Aldrich LOPAC¹²⁸⁰ Navigator 등)

■ Fragment Library

- 분자량 300이하 화합물을 대상으로 전체 대표 라이브러리와 동일한 선별과정을 적용하여 구축한 라이브러리

■ 천연물 Library

- 한국화학연구원에서 수년간 각종 연구 과제를 수행하면서 100여종의 식물체로부터 분리 정제한 단일성분 천연식물성분 화합물로 terpene, flavonoid, stilbene, alkaloid, lignan 및 saponin류의 라이브러리

■ PharmaCore Collection

- 시험기관의 요청에 의해 별도 선정되는 화합물 라이브러리
- 특정 골격만을 대상으로 하거나 분자모델링 방법을 적용하여 선정되는 화합물 등이 대상이며 별도 협의 필요

[한국화학물은행 제공 화합물의 활용결과(논문, 특허 등)에 대한 권리관계 규정]

한국화학물은행 화합물을 사용하여 도출된 연구결과의 권리관계에 대한 한국화학물은행 기본 정책에 대하여 알려드립니다.

[1] 규정 목적

- 한국화학물은행은 기탁자들이 기탁한 화합물을 바탕으로 운영되고 있습니다.
- 기탁자들의 **화합물 기탁을 장려**하기 위하여 기탁자들에게 최소한의 혜택을 드리며, 동시에 화합물 **사용자들의 불편함을 최소화** 하기 위하여, 한국화학물은행이 제공한 화합물을 활용하여 도출된 연구결과(논문, 특허 등)의 권리관계에 대하여 아래와 같은 규정을 적용합니다.
- 한국화학물은행 활용결과의 권리규정은 과학계에서 통용되는 연구결과 기여도에 대한 "연구윤리 기본원칙"을 따르고 있습니다.

[2] 규정 내용

- **활용결과(논문, 특허 등)에 대한 권리관계 규정**
 - 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)를 하였을 경우에는 기여도에 따라 기탁자를 논문공저자 및 특허 공동발명인(공동출원인)으로 "**포함**"을 장려합니다.
 - ③ 기탁자의 추가적인 기여가 없으며 기탁자가 물질특허가 있는 경우,
활용결과에 대한 "**용도특허**"는 사용자(발견자)에게 귀속되며 "**물질특허**"에 관해서는 기탁자와 협의하여야 합니다.
 - ④ 기탁자의 추가적인 기여가 없으며 기탁자가 물질특허가 없는 경우,
사용자(발견자)가 "**물질특허**"를 취득할 수 있으나, 기탁자에게 사전 공지와 협의가 필요할 것입니다.
- 모든 발표(논문 및 학회 등)에는 "한국화학물은행 제공 화합물을 사용하여 연구가 진행되었다"는 사사(acknowledgement)를 기재하여야 합니다.

[영문 사사 문구]

The chemical library used in this study was kindly provided by Korea Chemical Bank (www.chembank.org) of Korea Research Institute of Chemical Technology.

화합물 활용 계약서 (시험결과의 활용) ①항에 따라 "활용기관은 화합물에 대한 시험결과를 활용하여 논문, 학회발표, 특허, 컨퍼런스, 출판물 등에 공개 또는 발표할 경우 **화합물의 출처로서 한국화학물은행을 기재하여야 한다.**"

[한국화학물은행 홈페이지에서 화합물 구조 검색]

■ 한국화학물은행 홈페이지에서 구조공개 가능 화합물에 대한 구조검색 방법

1. www.chembank.org 접속 >> 구매화합물 검색 >> 구조 및 키워드 검색

- Exact, Substructure, Similarity 검색 가능



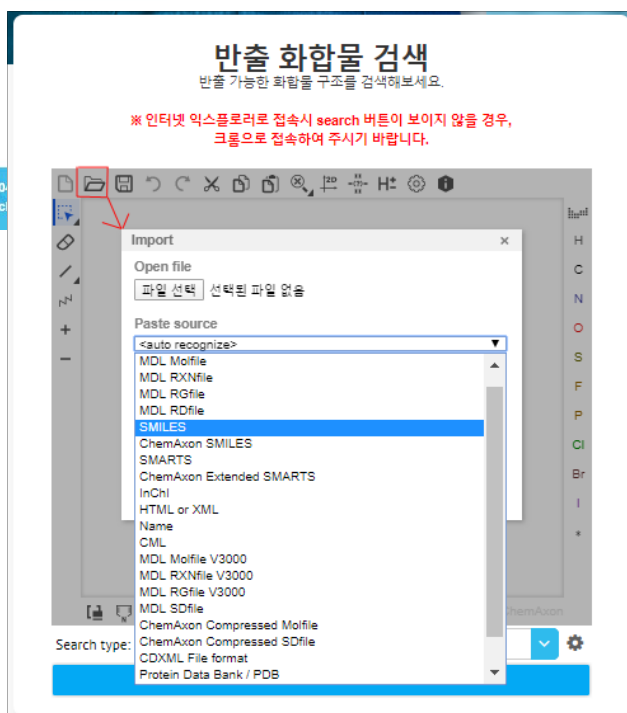
신약개발의 첫 걸음을 시작하세요
신약개발 연구에 필요한 화합물이 있다면 먼저 한국화학물은행에 문의주세요!

[화합물 활용]

매년 20-40만종의 한국화학물은행의 화합물이 국내 산·학·연에 무료로 제공되어 150-200여개 과제(신규작성 60건 이상)에 대한 약효시험에 활용되고 있으며 현재까지 937건 이상의 다양한 작용점에 대한 약효검사에 활용되었습니다.

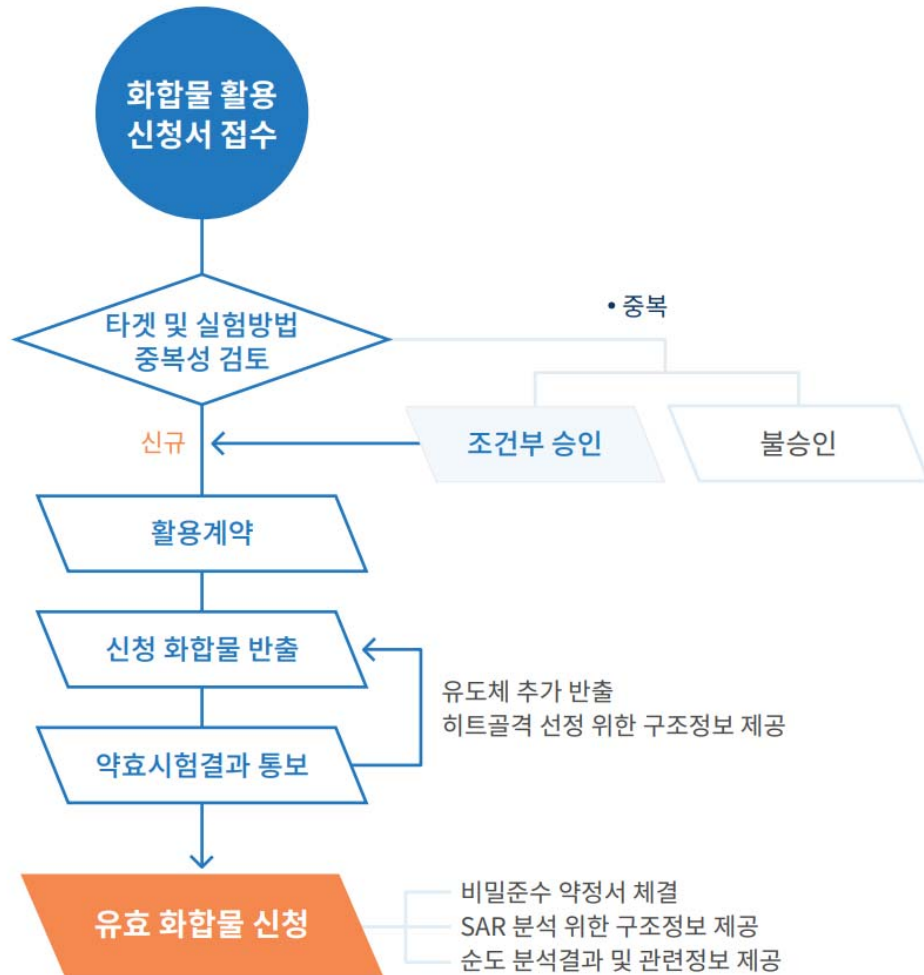
Hit 화합물에 대한 구조제공시 LC-MS 분석에 의한 순도 및 분자량 결정자료를 제공하고 있습니다.

▶ 화합물 활용 신청하기



[화합물 활용 절차]

1. 진행절차



신청서 제출 : chembank@krict.re.kr

제출 서류 : 사업자등록증, 화합물 활용 신청서

2. 화합물 활용 진행 절차

1) 화합물 활용 신청관련 서류 전송 및 접수

- ① 화합물 활용 신청관련 서류 전송
 - 화합물 활용 가이드북
 - 화합물 활용 신청서
 - 화합물 활용 계약서
- ② 화합물 활용 신청자는 “사업자등록증”과 “화합물 활용 신청서”를 작성하여 한국화합물은행 대표메일 (chembank@kriect.re.kr)로 송부

2) 화합물 활용 신청서 검토 및 승인

- ① 약효시험 승인심사 기준
 - 신청기관의 고효율 약효시험기술 수준, 약효시험기술 방법, 약효시험기술의 효율성, 신청한 화합물 수와 약효시험 농도, 목표작용점의 독창성 및 신규성, Hit 화합물을 발견할 경우 신약개발 가능성 등을 종합적으로 검토하여 승인을 결정
 - 신청서만으로 판단이 어려울 경우 약효시험 신청기관에게 운영위원회에서 신청 약효시험내용에 대한 발표를 요구할 수도 있음
- ② 약효시험 타겟 중복성 검토
 - 현재 진행중 또는 기 종료된 약효시험을 검색하여 신청 약효시험의 타겟 중복성을 검토
 - 기 수행중인 약효시험과 동일한 타겟에 대한 약효시험이 다시 신청되는 경우
 - 원칙적으로 선 수행 기관의 권리를 보호하기 위하여 화합물 반출 허용하지 않음
 - 단, 기술적으로 진보된 시험법이라고 판정되어 새로운 골격의 Hit 화합물을 발견할 가능성이 있다고 판단된 경우는 화합물 반출 할 수 있음.
 - 비록 진보된 약효 시험법이 아니라도 선 수행 약효시험에 포함되지 않은 Hit 화합물이 발견될 가능성이 있는 경우는 화합물을 제공할 수 있음
 - 동일한 타겟과 적용증에 대하여 동일한 대상화합물로 약효시험을 진행할 경우, 선수행 연구자와 유사(동일) hit 화합물이 발견될 가능성이 높기 때문에 선수행 연구자와 hit 화합물에 대한 권리관계가 상충될 수 있으므로 선수행자가 관련연구를 종료하기 전에는 화합물 반출을 허용하지 않음
 - 다만, 선수행 연구자와 동일(유사)한 hit 화합물이 발견되는 경우에는 선수행 연구자가 hit 화합물에 대한 우선적인 권리를 가진다는 내용에 동의하면 화합물을 반출할 수 있음
- ③ 약효시험 승인
 - 약효시험 승인심사 기준과 기존 진행중인 약효시험 자료 검색을 통하여 신청 약효시험의 중복성 여부를 검토한 후 신규하고 적절하다고 판단되면 화합물 반출을 승인
 - 필요한 경우, 전문가에게 신청약효시험의 적절성 및 신규성을 자문하여 승인여부를 결정할 수 있음

3) 화합물 활용계약 체결절차

- ① 화합물 활용기관에 검토된 내용 통보
- ② 직인, 간인된 화합물 활용 계약서-신청서 원본 서류 2부 제출
제출처: 대전광역시 유성구 가정로 141 한국화학연구원 한국화합물은행 E2연구동 108호 (우.34114)
전화, 042-860-7190
- ③ 한국화학연구원(한국화합물은행) 직인, 간인된 서류 1부를 활용기관에 발송

4) 화합물 반출 절차

- ① **“화합물반출의뢰서” 등록 - 9페이지 설명** (한국화학연구원을 제외한 기관 등록방법)
- ② 화합물 반출
 - 기본 5mM/5uL 반출 (DMSO 사용)
 - 화합물이 반출되면 Position, 농도(mM), 반출량(uL), 특이사항 기재 파일(plate map) 발송
 - Hit 화합물에 대한 재확인 및 농도 의존 실험을 위한 추가 반출의 경우 최대 5mM/30uL까지 반출 가능
- ③ 화합물 수령 방법
 - 방문 수령, 택배(착불) 수령, 퀵서비스(수신자 부담) 중 선택
 - 대량의 plate 반출시 협의 필요
- ④ 활용 결과 회신
 - 화합물 활용결과는 반출후 4개월 이내 회신
 - Hit 도출시 재확인 및 추가 실험을 위한 2차 반출은 1차 활용결과 회신 후 가능

3. 약효시험 진행 및 Hit 화합물 선정 절차

1) 약효시험 결과 수령

- 화합물 반출 4개월 이내 약효시험기관은 한국화합물은행에 반출 화합물의 약효시험결과를 제출

2) Hit 선정 절차

- ① Hit 화합물 선정(약효시험기관 및 한국화합물은행)
 - 반출된 화합물의 초기 HTS를 수행하여 해당 타겟에 대하여 의미 있는 약효를 가지는 것으로 판단되는 화합물을 Hit 화합물로 선정함
- ② Hit 화합물에 관한 정보제공
 - 한국화합물은행이 제공하는 Hit 화합물에 관한 정보는 해당 약효시험 연구에만 활용하며 한국화합물은행의 동의없이 제3자에게 공개하거나 양도하지 않는다는 비밀준수약정서 체결 후 Hit 화합물에 관한 정보제공 함
 - 선정된 Hit 화합물에 관한 정보(구조정보 포함) 송부
 - 연구자 요청시, 초기 Hit 화합물의 유도체 검색을 통하여 선택된 유도체 화합물을 반출하여 약효시험을 재 실시한 후 Hit 화합물을 추가적으로 선정 할 수 있음

- 기탁화합물인 경우, 시험기관에는 Hit 화합물에 관한 구조정보를 발송하고 동시에 기탁기관에도 Hit 선정결과 통보함

③ Hit 화합물 분석정보 제공

- 한국화합물은행은 약효시험기관에 Hit 화합물에 대한 LC/MS 분석보고서 발송함 (약효 상위 20개 이내 화합물)

3) 약효시험 결과설명회 개최 (시험기관, 기탁기관 및 한국화합물은행)

- 약효시험기관이 원할 경우, 기탁화합물에 대한 약효시험결과를 논의하기 위하여 기탁기관과 한국화합물은행 참여하에 약효시험 결과설명회를 개최할 수 있다.

4) Hit 화합물 추가 평가연구

- 시험기관 주도로 초기 Hit 화합물 추가 평가연구 수행 (유도체 합성, 약물성, 독성 시험 등)
- **시험기관은 정기적으로 추가 평가연구결과를 서면 또는 이메일로 한국화합물은행에 통지 하여야 함**
- Hit 화합물 선정 후 1년 이내에 추가 평가연구결과를 한국화합물은행에 통지하지 않는 경우, 추가연구 의사가 없는 것으로 간주하고 연구를 종료한다.
- 상기의 경우 연구종료시점까지의 연구결과는 약효시험기관과 한국화합물은행이 공유한다.
- 상기의 경우 한국화합물은행은 연구결과의 사장을 방지하기 위하여 연구결과를 일반에 공개하거나 제3자를 선정하여 추가연구를 진행 할 수 있다.

[화합물 반출실비 부과 시행 안내]

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

- 2019년 1월 1일부터 화합물 반출실비의 25% 활용자 부담
- **2020년 1월 1일부터 화합물 반출실비의 50% 활용자 부담**
- 2021년 1월 1일부터 화합물 반출실비의 75% 활용자 부담
- 2022년 1월 1일부터 화합물 반출실비의 100% 활용자 부담

반출실비 산출근거

- 화합물은 무료로 제공
- 화합물 제공에 소요되는 실비만 사용자 부담 (plate, 분주팁, 튜브캡 비용 등)
- 화합물 구매, 보관, 관리 비용 및 인건비 제외

Plate 종류	Plate 개수	단 가	2020년 (대기업/중견기업) ¹	2020년 (중소/벤처/대학교/연구소) ²
96-Well (80종/1plate)	1	23,300원	11,600원	5,800원
384-Well (320종/1plate)	1	89,300원	44,600원	22,300원

* 부가세 별도

¹대기업/중견기업 : 실비의 50% 활용자가 부담

²중소/벤처/대학교/연구소 : 실비의 50%에 추가 50% 할인된 금액(25%) 활용자가 부담

※ 화합물 반출 배송(택배)은 착불로 진행됩니다.

[화합물반출의뢰서 및 카드결재, 세금계산서 발행 방법]

1) 한국화학연구원 홈페이지 접속 (<http://www.kRICT.re.kr>)

→ “시험·분석 평가 신청 바로가기” 선택

(Direct URL: <http://www.kRICT.re.kr/analyze/login.htm>)



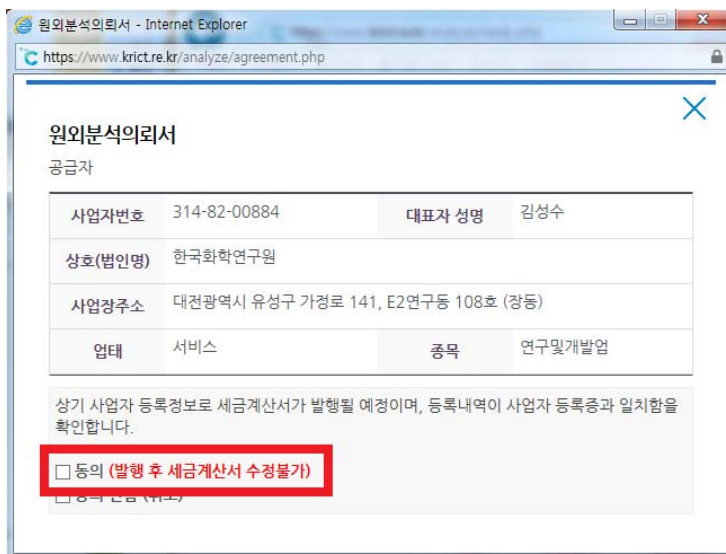
2) 로그인 (처음인 경우 : 회원등록)

- 회원가입시 사업자등록정보는 세금계산서 발행에 반영이 되므로 반드시 "**사업자등록증과 일치**" 하도록 기입
- 중소/벤처기업인 경우는 "**중소기업확인서**" 증빙자료 제출
→ Fax : 042)860-7096, E-mail : yurilee@kRICT.re.kr

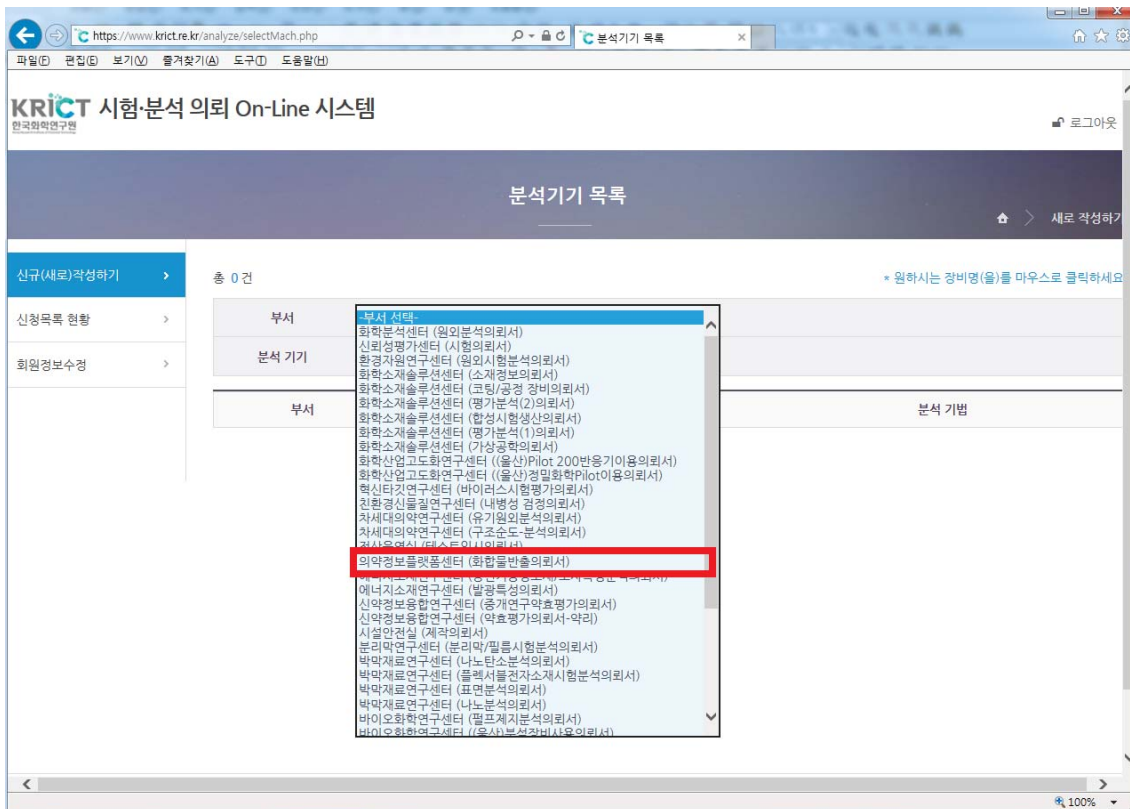


3) "신규(새로)작성하기" 선택 → "동의" 체크

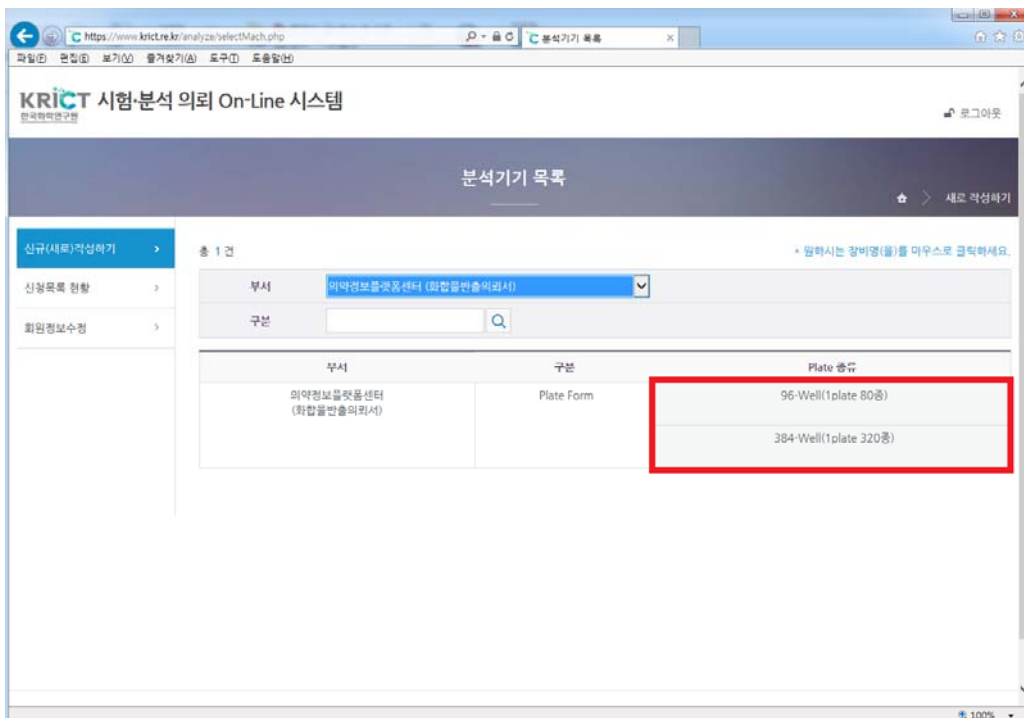
- 사업자등록증의 변경사항이 있는 경우 : "**회원정보수정**"에서 수정
- 세금계산서를 받을 E-mail이 변경 되었을 경우
: "**회원정보수정**"에서 "**세금계산서발행 E-mail**" 수정 후 의뢰서 작성



4) 부서 선택 : “의약정보플랫폼센터(화합물반출의뢰서)” 선택



5) “Plate 종류” 선택 : 96-Well(1plate 80종), 384-Well(1plate 320종)



6) 화합물 반출 의뢰서 작성 방법

- ① 시료명 : "화합물활용 책임자명 - 반출 요청 화합물수" 기재
- ② "요청사항" 기재
- ③ 시료 취급 및 주의 사항 선택
- ④ 반출요청 할 "화합물수" 기재 : Plate 개수는 자동계산
 - Plate 종류 추가 할 경우 "+" 선택, 삭제 할 경우 "-" 선택
 - * "+", "-" 안보일 경우 구글 크롬(Chrome) 브라우저에서 신청
(ActiveX 혹은 특정버전의 브라우저는 HTML 표준을 완벽히 지원하지 않아 발생)
- ⑤ 세금계산서 발행 : "청구" 선택
- ⑥ "작성완료" 선택

* 표시 항목은 필수 입력항목입니다.

접수번호		의뢰일자	2019년 03월 19일
상호(법인명)	한국화학연구원	* 희망 완료일	
사업장 소재지	대전광역시 유성구 가경로 141, E2연구동 108호 (강동)		
우편물 수령지	우) 34114 Q 대전광역시 유성구 가경로 141, E2연구동 108호 (강동)		
사업자번호(~~포함)	314-82-00884	대표자 성명	김성수
업종	연구및개발업	업태	서비스
성명	이유리	E-mail	
전화번호	042-860-7092	세금계산서 발행 E-mail	
휴대전화		FAX	
시료명			
* 요청사항			
* 비고			
시료 취급 및 주의 사항	☐ 취급 주의 ☐ 없음		
* 분석기기 추가/삭제를 하실 수 있습니다			
구분	Plate 종류	화합물수	Plate 개수 <input button"="" type="button" value="-"/>
세금계산서 발행 ☐ 청구 ☐ 영수 ☐ 미발행			

✓ 작성완료

신청취소

7) 화합물반출의뢰서 수정 할 경우

- "신청목록 현황" → 신청 → 우측상단 수정 선택
- 반출요청 할 "Plate 종류", "화합물수" 기재 : Plate 개수는 자동계산
Plate 종류 추가 할 경우 "+" 선택, 삭제 할 경우 "-" 선택
- * 수정을 할 경우 신청 할 Plate 종류 및 화합물수를 다시 입력해야 함

8) 화합물반출의뢰서 및 세금계산서 발행 완료

- "화합물반출의뢰서" : 신청목록 현황에서 출력
- 신청의뢰 확인 및 접수 완료시 의뢰자에게 메일 전송

▶ 시험/분석 신청건을 확인하였습니다. (2019-12-29-1) 인쇄 일정등록 원문보기

보낸사람 : + 접수담당자
받는사람 : + 박은숙
보낸날짜 : 2019/12/29 일요일 오후 2:18:44

첨부파일이 없습니다.

다음 신청건에 관한 시료와 의뢰서를 당 연구원에 우송해 주시기 바라며,
시료 도착후 시험/분석 가능 여부 및 시험/분석료를 산정할 수 있습니다.

접수가 완료되면 인터넷 신청화면에서 거래내역서(입금계좌 포함)를 의뢰인께서 확인하실 수가 있으며, 계산서(청구)를 요청하신 경우 우편(등기)으로 발송됩니다.

분석부서 : 전산운영실
의뢰서 : 테스트임시의뢰서

신청일자 : 2019-12-29
신청순번 : 1
기기명 : GC/MS

기법명 : 정량분석
기타 자세한 사항은 기기 담당자에게 문의하시기 바랍니다.

※ 주의 : 15일 이내에 당 연구원에 시료와 의뢰서가 도착되지 않을 경우에는 접수
가 취소됩니다.

한국화학연구원 시험분석 의뢰 On-line 시스템에서 발송된 발신전송 메일입니다.

▶ 시험/분석 신청건이 분석완료 되었습니다. 결제를 진행하세요. (2019-12-29-1) 인쇄 일정등록 원문보기

보낸사람 : + 접수담당자
받는사람 : + 박은숙
보낸날짜 : 2019/12/29 일요일 오후 2:33:44

첨부파일이 없습니다.

요청하신 시험건의 분석이 완료되었습니다.
분석 홈페이지에서 결제(세금계산서 또는 카드결제)를 진행하세요.

※2020.1.1일부터 본 메일 수신 후 홈페이지에 접속하여 결제방법(세금계산서 또는 신용카드)을 반드시 선택해야 합니다.

분석부서 : 전산운영실
의뢰서 : 테스트임시의뢰서

신청일자 : 2019-12-29
신청순번 : 1
기기명 : GC/MS

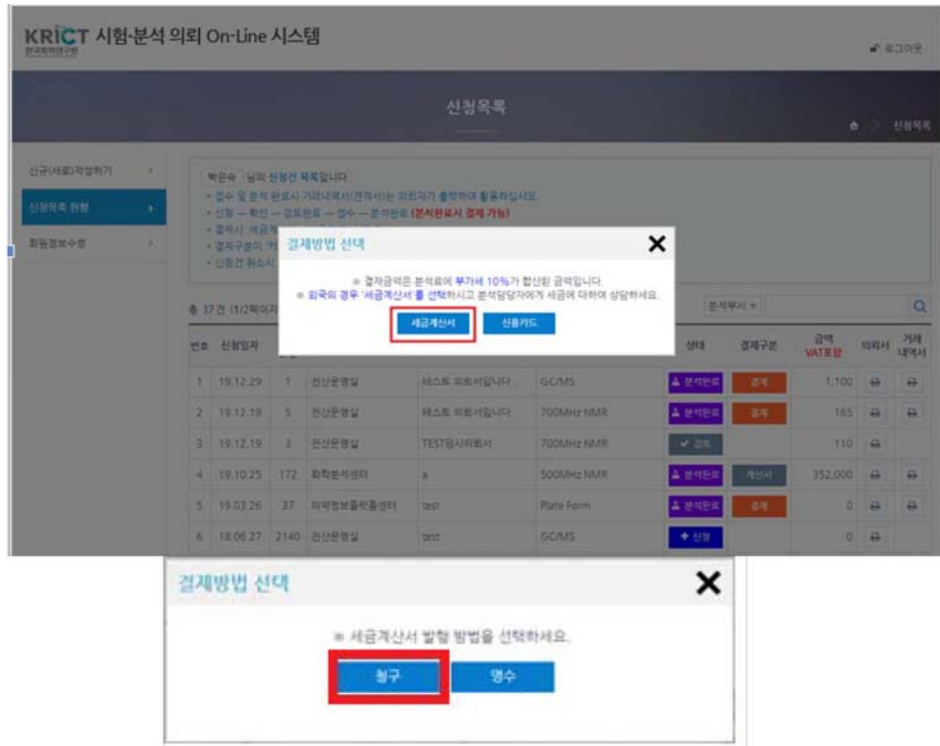
기법명 : 정량분석
기타 자세한 사항은 기기 담당자에게 문의하시기 바랍니다.

한국화학연구원 시험분석 의뢰 On-line 시스템에서 발송된 발신전송 메일입니다.

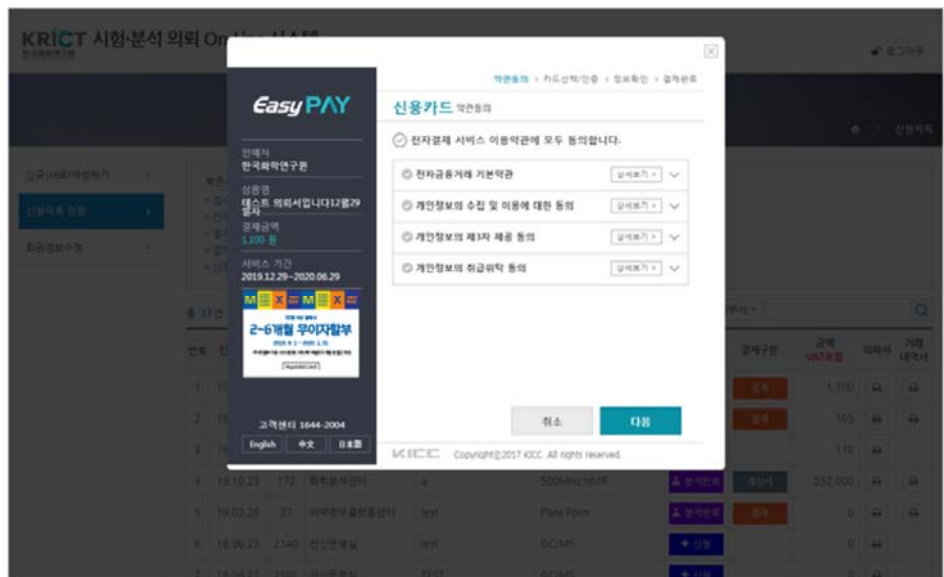
9) 홈페이지에서 결제 방법 선택

- “신청목록 현황” → “결제구분” 결제방법 선택

① 세금계산서 선택할 때



② 신용카드 선택할 때



* 결제 취소시 yurilee@kricr.re.kr, 042)860-7092로 연락바랍니다.

* 재결재를 원할시에는 신규 신청하여야 합니다.

10) 거래내역서 출력

- "거래내역서" : 신청목록 현황에서 출력 가능

* 거래내역서 출력에 문제가 있을시 yurilee@krict.re.kr, 042)860-7092로 연락바랍니다.

KRICT 시험·분석 의뢰 On-Line 시스템 로그아웃

신청목록

신규(새로)작성하기 >
신청목록 현황 >
회원정보수정 >

이유리 님의 신청건 목록입니다.
* 접수 완료시 거래내역서(견적서)는 의뢰자가 출력하여 활용하십시오.
* 신청 → 확인 → 검토완료 → 접수
* 신청건 취소시 분석부서에 문의하세요.

총 1 건 (1/1 페이지) 분석부서 []

번호	신청일자	신청순번	분석부서	시료명	기기명	상태	의뢰서	거래내역서
1	2019-04-04	98	의약정보플랫폼센터		Plate Form	+ 신청		

1