KCB 데이터 플랫폼 (demo.chembank.org) 클라이언트 기능 소개

2020.05

한국화합물은행



• 시스템 소개



demo.chembank.org



신규

66

화합물 활용 지원의 경제적 가치평가 (2018년) 25.3만종 x 4만원 = 101억원 수입대체효과 (Cremdiv 2017년 최저 구메가격 5367%)

통계 바로가기

신규

117

신규

191,810

2



과학기술정보통신부

구조검색

•

- Exact search: 화학구조 1:1 매칭
- Substructure search: 검색구조를 포함한 상위 구조
- Similarity search: 검색구조와 유사한 구조

화합물 검색

화합물 은행에서 제공하는 다양한 화합물의 쉽게 찾을 수 있습니다.



한국화합물은행





ChemDraw에 있는 구조 복사하여 검색

1) ChemDraw에서 해당 구조 선택 후, Edit -> Copy As -> SMILES로 복사 2) 사이트 구조검색창에 붙여넣기 -> 검색하기



한국화합물은행

성질 검색

•

- 물질 등록 시 디스크립터 및 물성 계산 프로그램을 통해 사전계산하여 데이터베이스 구축
- Properties
 - Rule of Five
 - No more than 5 hydrogen bond donors
 - No more than 10 hydrogen bond acceptors
 - A molecular mass less than 500 daltons
 - An octanol-water partition coefficient[6] (log P) that does not exceed 5
 - Drug likeness
 - "A knowledge-based approach in designing combinatorial or medicinal chemistry libraries for drug discovery. 1. A qualitative and quantitative characterization of known drug databases". *J Comb Chem.* 1 (1): 55–68.
 - Partition coefficient log P in -0.4 to +5.6 range
 - Molar refractivity from 40 to 130
 - Molecular weight from 160 to 480
 - Number of atoms from 20 to 70 (includes H-bond donors [e.g. OHs and NHs] and H-bond acceptors [e.g. Ns and Os])
 - Lead likeness
 - Congreve, M., Carr, R., Murray, C. & Jhoti, H. A 'Rule of Three' for fragment-based lead discovery. Drug Discov. Today 8, 876–877 (2003).

화합물 검색

화합물 은행에서 제공하는 다양한 화합물의 쉽게 찾을 수 있습니다.						
키워드 검색	구조 검색	성질 검색	질병 검색	타겟 검색	SDF 파일 검색	
AlogP98			-14 🔶		• 19.6	
MW			200 -	• •	700	
> Number of atoms						
> Number of bonds						
✓ 🗕 Number of Rings						
All Ring			0		• 14	
Aromatic Ring			0	-	3	
V Number of Hydroge	en bonds					
HB Donor			0 •		23	
HB Acceptor			0 🔶		49	
Ratio DON/ACC			0		8	
Rule of Five(RO5)					0	
Druglikeness						
Lead-like(RO3)					0	
		검색	백하기			

한국화합물은행

질병 검색

•

- **KEGG Human Diseases Classification** _
 - Genetic perturbation
 - ٠
- 1,992 diseases _

화합물 검색



한국화합물은행

타겟 검색

•

- ChEMBL Target Classification
- 12,549 targets
- ChEMBL에서 정의한 대로 최대한 알려진 모든 타겟 정보를 가지고 있음.
- ChEMBL Assay Data 중 신뢰도가 높고, Bioactive한 화합물을 선별하여 검색
- 향후 약효 프로젝트 타겟 선택과 연동되는 부분이 라 타겟 검색에 물질이 검색되지 않는 타겟도 포함 되어 있음.

화합물	물 검	 산식 하는 다양한 화합물의 쉽기	케 찾을 수 있습니다.					
키워드 경	검색	구조 검색	성질 검색	질병 검색	타겟 검색	SDF 파일 검색		
겟 검색								
 Target 	15				Ta	rget Search		
✓ Enzy	/me 16	62						
V Kinase 12						검색하기		
\sim	Protei	in Kinase 🛛 13			•			
	V TH	(protein kinase group	26					
	\sim	Tyrosine protein kinase	PDGFR family 12					
		Tyrosine-protein kin	ase receptor FLT3					
		Receptor-type tyrosi	ne-protein kinase FLT3					
	\sim	Tyrosine protein kinase	VEGFR family 13					
		Vascular endothelia	growth factor receptor 1	and 2 (Flt-1 and KDR)				
		Vascular endothelia	growth factor receptor 2	and 3 (KDR and Flt-4)				





•



화합물 상세정보: Related Target List

- ChEMBL에 보고된 실험된 target 정보 리스트 표시
- 외부링크를 클릭하여 ChEBML 사이트 확인 가능



<Dasatinib>

CHEMBL	DRUGBANK	PDB	
arget List			
yrosine-protein kinase l	Lyn		d ²
RL95-2			d ²
DMS-153			6 ²
KE-37			63
Tyrosine-protein kinase r	receptor FLT3		63
TE-11			ð
MHH-CALL-2			ð
NCI-H2126			ê
NB1			ê
NCI-H748			d ²
C2BBe1			e
Wee1-like protein kinase	e 2		63
HCT-116			63
A549			63
PC-3			67
Vascular endothelial gro	with factor receptor 2		63
NCI-H460			63
GOTO			63
HC-1			63
SJSA-1			62
СМК			63
COLO-684			63
fyrosine-protein kinase /	ABL		0
			1

•

한국화합물은행

4.014 4 7 107.71 0 0건

화합물 상세정보: Related Drug List

- DrugBank에 보고된 시판약물 약물 후보물질 정보 _
- 외부링크를 클릭하여 DrugBank 사이트 확인 가능 —

🗅 Compound 상세정보

505.166	MW			
C22H28CIN7O35	Formula			
4.014	LogP		5	
4	HBD		Y	
7	НВА		I QL a	#,0
107.71	PSA			
0	Lipinski		₩ m	
0 건	약효시험반술읫수			
	기타			
		PDB	DRUGBANK	CHEMBL
	1			

Drug List

Dasatinib



•



화합물 상세정보: Related Protein List

- PDB에 보고된 결합된 Ligand 정보
- 링크를 클릭하여 화합물은행에서 자체 구축한 protein viewer 사이트에서 구조정보 확인



<Dasatinib>

11

1	1		ľ	
CHEMBL	DRUGBANK	PDB		
Protein Code List				
5H2U				
3LFA				
301.6				
35XR				
4QMS				
3G5D				
30HT				
5I9Y				
SVCV				
5000				
2ZVA				
30CT				
4XLI				
5BVW				
SOWR				
50m				
6BSD				
6FNM				
2Y60				
4XEY				
2606				
3824				

PDB의 모든 정보는 KCB DB에 있어 서 외부 연결없이 view가 가능 (클릭시 다음 슬라이드의 protein viewer로 이동)

• 단백질 구조 검색

한국화합물은행

Protein 구조 검색 방법

•

- PDB ID 직접 검색
- 화합물검색 결과에 연동된 단백질 정보 링크
- Protein 데이터 구성
 - Protein structure
 - Binding-site information
 - Ligand information



<Dasatinib binding protein - 3LFA>

• 익명사용자 - 비활성 기능



- 검색결과: 약효 프로젝트 연동

프로젝트

- 기탁 프로젝트
- 약효 프로젝트
- 데이터 프로젝트

라이브러리

•

- 제공 라이브러리
- MY 라이브러리

한국화합물은행