

화합물 활용 가이드북

2021

한국화합물은행

[34114]

대전광역시 유성구 가정로 141
한국화학연구원 한국화합물은행

Tel : 042-860-7190

Fax : 042-860-7096

E-Mail : chembank@kriict.re.kr

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

[한국화합물은행 제공 라이브러리 현황]

라이브러리 종류	화합물수	농도(평균)	설 명
전체 Library	650,000	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	2,900	5 mM, 5 uL	임상 I-III상 단계 화합물 및 승인 약물(clinically active compounds)
Fragment Library	1,600	20 mM, 5 uL	분자량 300이하 라이브러리, 순도 및 분자량 검증(LC/MS)
천연물 Library	1,300	5 mM, 5 uL	단일성분 천연물 및 천연물 유사골격(natural product-like) 구조의 화합물
GPCR Library	9,000	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 65만종의 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 단일 성분 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)을 하였을 경우에는 기여도에 따라 기탁자를 논문공저자 및 특허 공동발명인(공동출원인)으로 "**포함**"을 장려합니다.
 - ③ 기탁자의 추가적인 기여가 없으며 기탁자가 "**물질특허**"가 있는 경우, 활용결과에 대한 "**용도특허**"는 사용자(발견자)가 취득할 수 있으며, "**물질특허**"를 소지한 기탁자와의 협의를 권장합니다.
 - ④ 기탁자의 추가적인 기여가 없으며 기탁자가 "**물질특허**"가 없는 경우, 사용자(발견자)가 "**물질특허**"를 취득할 수 있으나, 기탁자에게 사전 공지와 협의가 필요할 것입니다.
- **본 결과를 활용하여 논문, 특허 등에 공개 또는 발표할 경우 "한국화학물은행 제공 화합물을 사용하여 연구가 진행되었다"는 사사(acknowledgement)를 기재하여야 합니다.**
(특허는 명세서의 "발명의 설명"에 사사(acknowledgement)를 기재합니다.)

[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.**"

[한국화합물은행 홈페이지에서 화합물 구조 검색]

▣ 한국화합물은행 통합데이터 플랫폼을 이용한 구조공개 가능 화합물 검색 방법

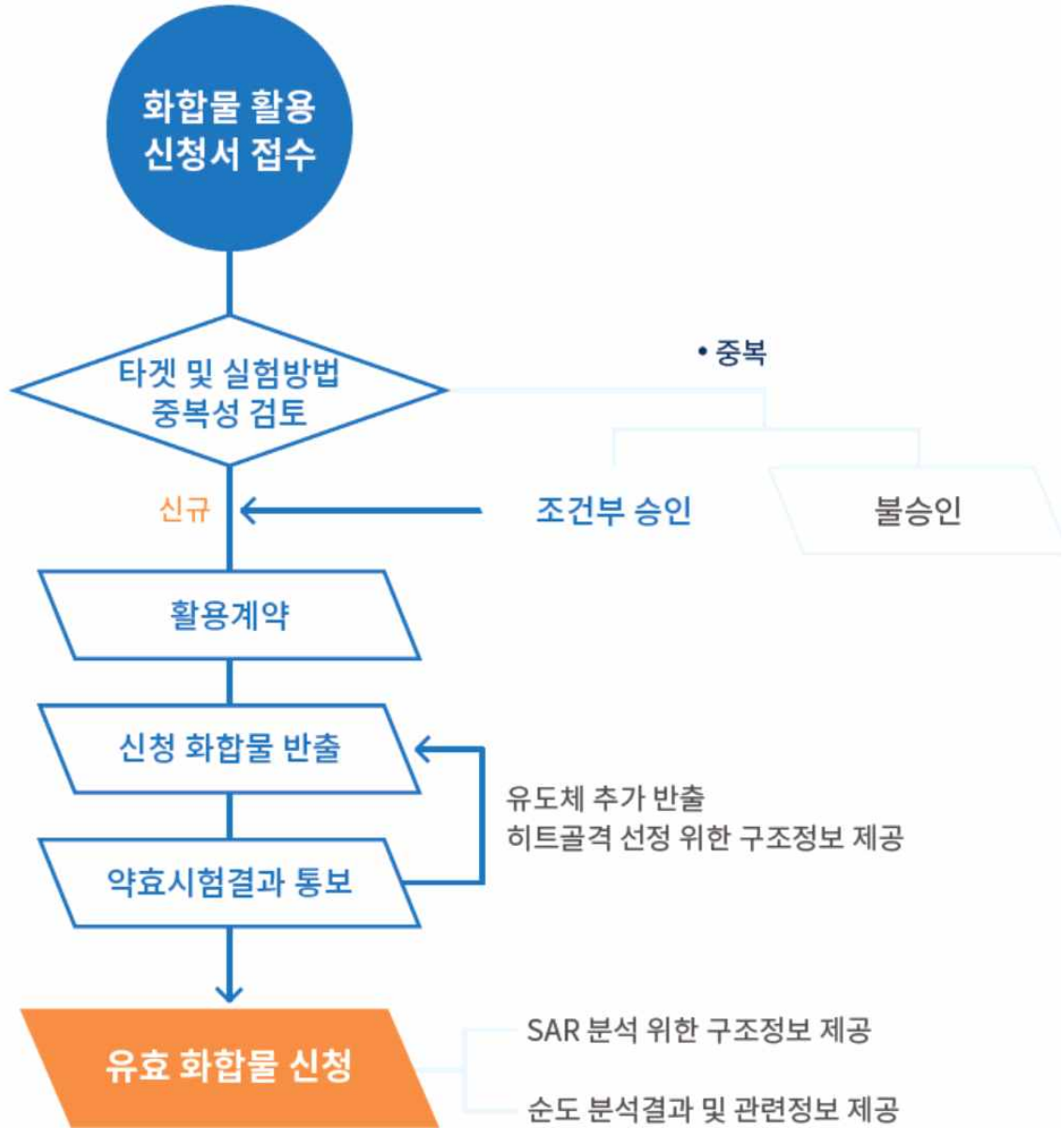
1. korea.chembank.org 접속
2. 통합검색(SMILES, 질병, 타겟, 화학식, 약품명 등), 구조검색, 성질 검색을 통하여 화합물 검색

The image displays several screenshots from the Korea Chemical Bank website, illustrating the search process:

- Home Page:** Shows the main navigation menu with options like '통합검색' (Integrated Search), '구조검색' (Structure Search), '성질 검색' (Property Search), '질병 검색' (Disease Search), and '타겟 검색' (Target Search).
- Compound Search (화합물 검색):** A detailed view of the search interface with tabs for '키워드 검색' (Keyword Search), '구조 검색' (Structure Search), '성질 검색' (Property Search), '질병 검색' (Disease Search), '타겟 검색' (Target Search), and 'SDF 파일 검색' (SDF File Search). A '통합 검색' (Integrated Search) button is highlighted.
- Structure Search (구조 검색):** Shows a chemical structure editor with a '구조 검색' (Structure Search) button.
- Property Search (성질 검색):** Displays various chemical properties such as 'MolWt', 'MW', 'Number of atoms', 'Number of bonds', 'Number of Rings', and 'Number of Hydrogen bonds'. A '성질 검색' (Property Search) button is highlighted.
- Disease Search (질병 검색):** Lists various human diseases like 'Cancers', 'Cardiovascular diseases', 'Congenital disorders of metabolism', etc., with a '질병 검색' (Disease Search) button.
- Target Search (타겟 검색):** Lists various biological targets like 'Adhesion', 'Auxiliary transport protein', 'Enzyme', etc., with a '타겟 검색' (Target Search) button.
- Compound List Search (화합물 다량 검색):** A search interface for finding multiple compounds, with a '화합물 다량 검색' (Compound List Search) button.

[화합물 활용 절차]

1. 진행절차



신청서 제출 : chembank@kriict.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 화합물수와 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 약효시험 내용에 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 승인 여부를 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 5 mM/5 uL 반출 (DMSO 사용)
 - 화합물이 반출되면 Position, 농도(mM), 반출양(uL), 특이사항 기재 파일(plate map) 발송
 - Hit 화합물에 대한 재확인 및 농도 의존 실험을 위한 추가 반출의 경우 최대 5 mM/ 30 uL까지 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

- 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 진행할 수 있다.

[화합물 반출실비 부과 시행 안내]

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

- 2019년 1월 1일부터 화합물 반출실비의 25%利用者 부담
- 2020년 1월 1일부터 화합물 반출실비의 50%利用者 부담
- **2021년 1월 1일부터 화합물 반출실비의 75%利用者 부담**
- 2022년 1월 1일부터 화합물 반출실비의 100%利用者 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	2021년 (대기업/중견기업) ¹	2021년 (중소/벤처/대학교/연구소) ²
96-Well (80종/1plate)	1	23,300원	17,400원	8,700원
384-Well (320종/1plate)	1	89,300원	66,900원	33,450원

* 부가세 별도

¹대기업/중견기업 : 실비의 75% 利用자가 부담

²중소/벤처/대학교/연구소 : 실비의 75%에 추가 50% 할인된 금액(37.5%) 利用자가 부담

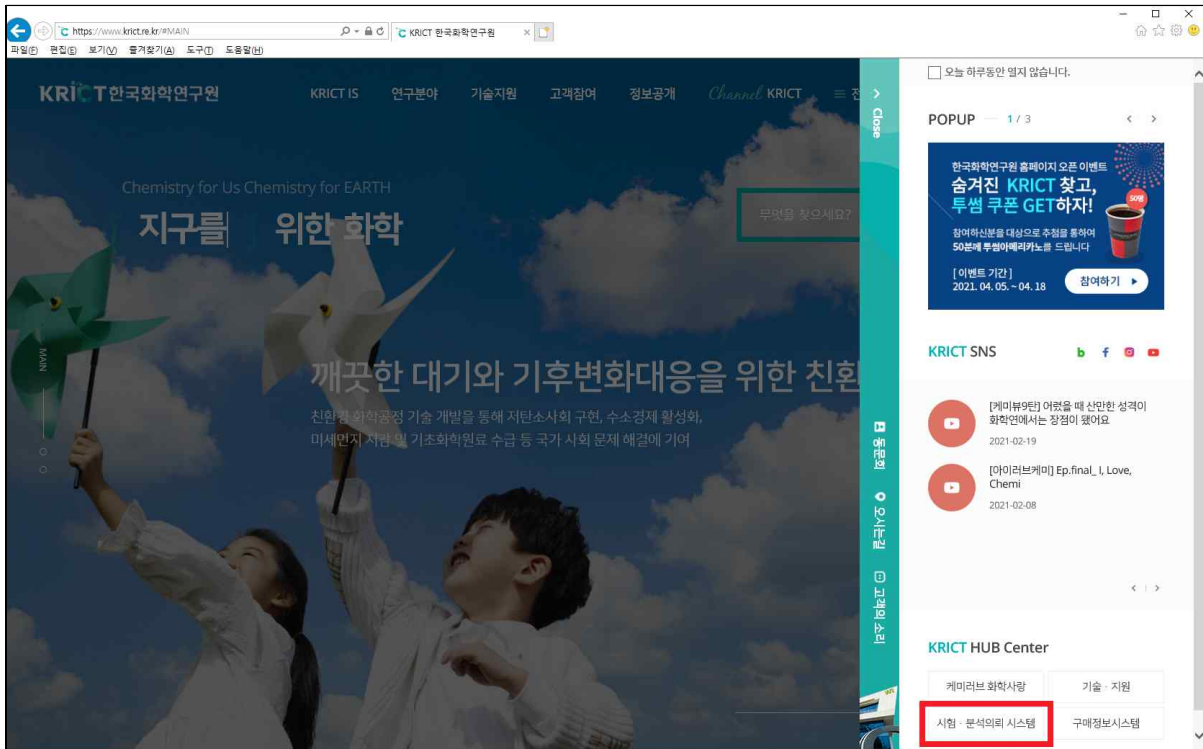
※ 화합물 반출 배송(택배)은 착불로 진행됩니다.

[화합물반출의뢰서 및 카드결제, 세금계산서 발행 방법]

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

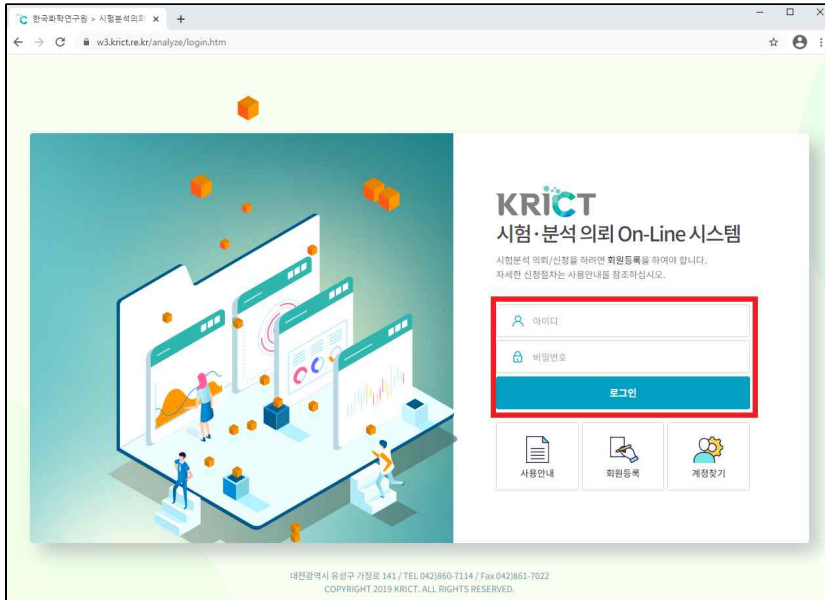
→ “시험·분석의뢰 시스템” 선택

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



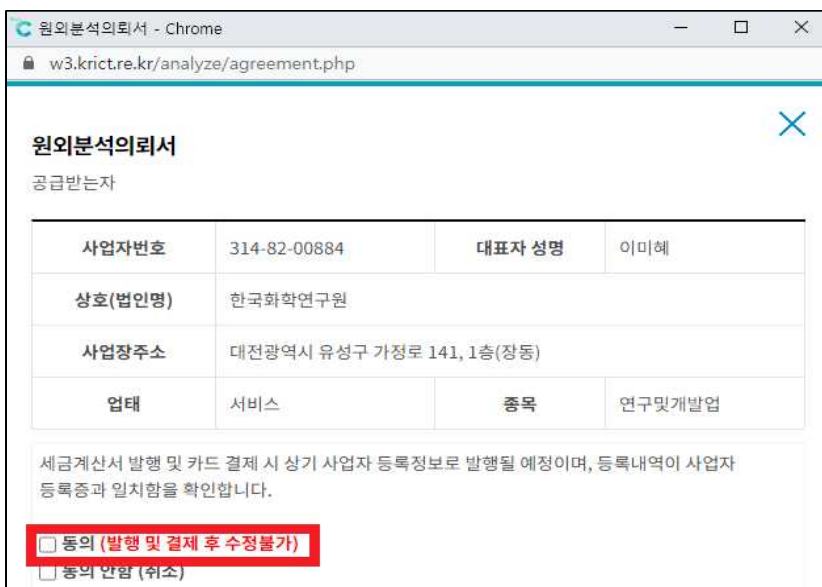
2) 로그인 (처음인 경우 : 회원등록)

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

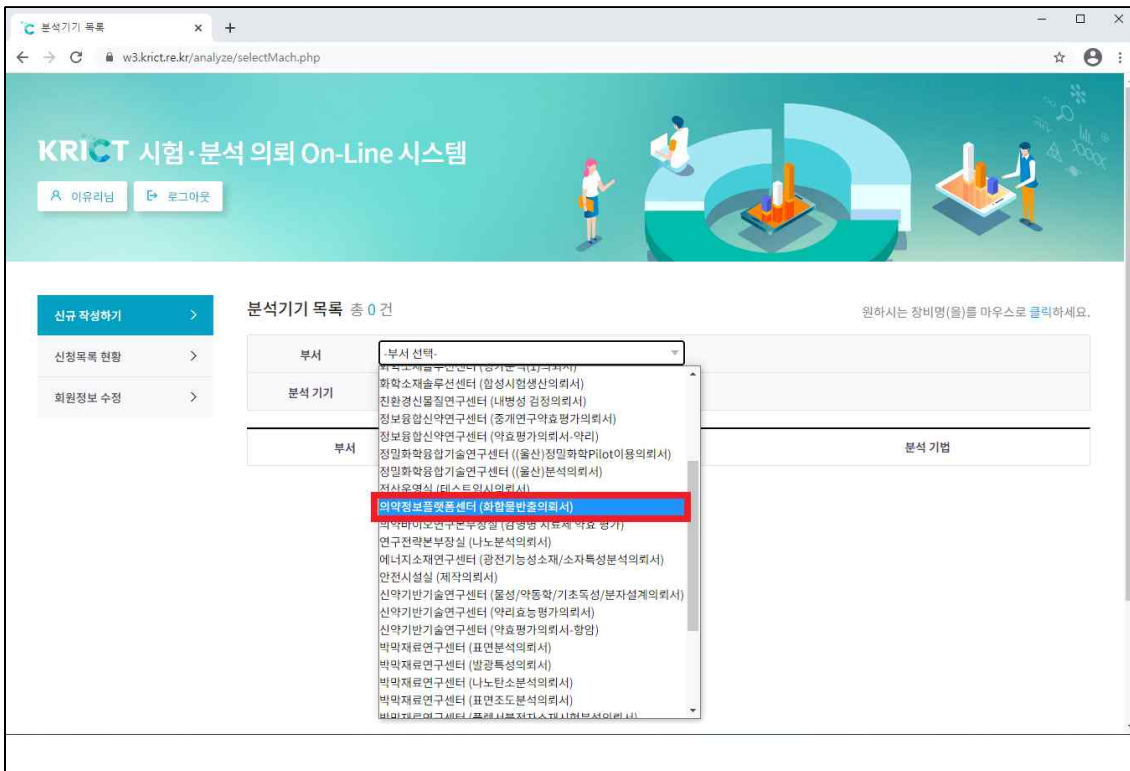


3) "신규(새로)작성하기" 선택 → "동의" 체크

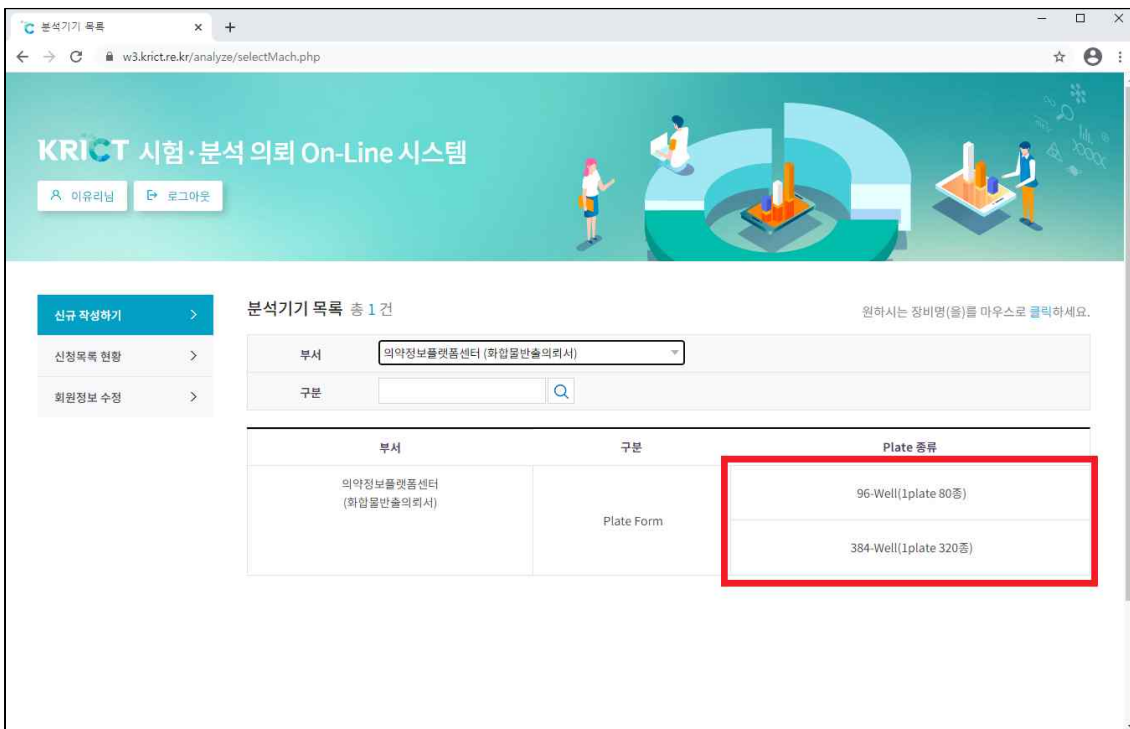
- 사업자등록증의 변경사항이 있는 경우 : "회원정보수정"에서 수정
- 세금계산서를 받을 E-mail이 변경 되었을 경우
: "회원정보수정"에서 "세금계산서발행 E-mail" 수정 후 의뢰서 작성



4) 부서 선택 : "의약정보플랫폼센터(화합물반출의뢰서)" 선택



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



6) 화합물반출의뢰서 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 "작성완료" 선택

• 표시 항목은 필수 입력항목입니다.

접수번호	<input type="text"/>	의뢰일자	2021년 04월 07일	
• 상호(법인명)	한국화학연구원	• 희망 완료일	<input type="text"/>	
• 사업장 소재지	대전광역시 유성구 기정로 141, 1층(장동)			
• 우편물 수령지	우) 34114 <input type="text"/> 대전광역시 유성구 기정로 141, E2연구동 108호 (장동)			
사업자번호('-'포함)	314-82-00884	• 대표자 성명	이미혜	
• 업종	연구및개발업	• 업태	서비스	
• 성명	이유리	• E-mail	yurilee@kRICT.re.kr	
• 전화번호	042-860-7092	세금계산서 발행 E-mail	yurilee@kRICT.re.kr	
• 휴대전화	<input type="text"/>	FAX	042- <input type="text"/>	
• 시료명	<input type="text"/>			
요청사항	<input type="text"/>			
비고	<input type="text"/>			
• 시료 취급 및 주의 사항	<input type="text"/>	• <input type="radio"/> 취급 주의 <input type="radio"/> 없음		
문석기기 추가/삭제를 하실 수 있습니다				
구분	Plate 종류	회합물수	Plate 개수	+
Plate Form	96-Well(1plate 80종)	<input type="text"/>	<input type="text"/>	-

7) 화합물반출의뢰서 수정 할 경우

- "신청목록현황" → 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 신청 확인 및 접수 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 접수가 취소됩니다.

한국화학연구원 시험분석 의뢰 On-line 시스템에서 발송된 발신전용 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 매일 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 발신전용 메일입니다.

9) 홈페이지에서 결제 방법 선택

- "신청목록현황" : "결제구분" 결제방법 선택하기

① 세금계산서 선택할 때

The screenshot shows the KRICT On-Line System interface. A modal dialog box titled "결제방법 선택" (Payment Method Selection) is displayed over a table of orders. The dialog box contains the following text: "결제금액은 분석료에 부가세 10%가 합산된 금액입니다." (The payment amount is the analysis fee plus 10% VAT.) and "외국의 경우 '세금계산서'를 선택하시고 분석담당자에게 세금을 대하여 상담하세요." (In the case of foreign countries, select 'Tax Invoice' and consult with the analysis manager regarding tax payment). There are two buttons: "세금계산서" (Tax Invoice) and "신용카드" (Credit Card). The "세금계산서" button is highlighted with a red box. Below this, another dialog box titled "결제방법 선택" (Payment Method Selection) is shown with the text "세금계산서 발행 방법을 선택하세요." (Select tax invoice issuance method) and two buttons: "청구" (Request) and "영수" (Receipt). The "청구" button is highlighted with a red box.

② 신용카드 선택할 때

The screenshot shows the KRICT On-Line System interface. A modal dialog box titled "신용카드" (Credit Card) is displayed over a table of orders. The dialog box contains the following text: "약관동의 > 카드선택/인증 > 정보확인 > 결제완료" (Terms of Service > Card Selection/Authentication > Information Confirmation > Payment Complete). Below this, there is a section for "전자결제 서비스 이용약관에 모두 동의합니다." (I agree to all terms of the electronic payment service) with a checked radio button. There are four dropdown menus for selecting terms of service: "전자결제용기에 기본약관" (Basic terms of service for electronic payment container), "개인정보의 수집 및 이용에 대한 동의" (Consent to collection and use of personal information), "개인정보의 제3자 제공 동의" (Consent to provision of personal information to third parties), and "개인정보의 취급위탁 동의" (Consent to entrustment of personal information handling). At the bottom, there are two buttons: "취소" (Cancel) and "다음" (Next). The "다음" button is highlighted.

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

* 재결제를 원할 시에는 신규 신청하여야 합니다.

10) 거래내역서 출력

- "거래내역서" : 신청 목록 현황에서 출력 가능

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

번호	신청일자	신청 순번	분석부서	시료명	기기명	상태	결제구분	금액 VAT포함	의뢰서	거래 내역서
1	19.12.29	1	전산운영실	테스트 의뢰서입니다 ..	GC/MS	분석완료	결제	1,100		