Korea Chemical Bank

한국화합물은행

공동 활용을 통한 화합물 가치 재창출

KRICT 한국화학연구원 Korea Research Institute of Chemical Technology

한국화합물은행 Korea Chemical Bank

과학기술정보통신부지정
연구성과 관리·유통 전담기관
- 화합물 전담기관 -

한국화합물은행 설립배경 및 연혁

화합물 라이브러리 구축 필요성

· Orphan target의 증가

내인성 리간드가 알려지지 않은 Orphan target의 발굴이 증대됨에 따라 random screening에 의한 hit 도출의 수요증가로 대규모 화합물 라이브러리 구축 필요성 증대

· IP 확보 경쟁의 심화

유망 타깃에 대한 IP 확보 경쟁이 심화됨에 따라 독창적 골격의 특허 선점을 위하여 다양성이 확보된 화합물 라이브러리 구축 필요성 증대

· 혁신신약 개발 확대

제도변화(허가 및 약가제도 등)에 의한 모방형 신약개발의 성공 가능성 및 사업성 저하로 혁신 신약개발이 확대됨에 따라, 초기 hit 발굴에 필수적인 대규모 화합물 라이브러리 구축 필요성 증대

한국화합물은행 설립목적

· 국내에서 합성되는 화합물 및 관련 정보를 범국가적 차원에서 수집하여 통합 관리하고 공동으로 활용하는 신약개발 및 바이오 연구의 핵심 인프라 구축

· 화합물을 매개로 산·학·연 기탁기관과 활용기관간의 공동연구 중개

한국화합물은행 연혁

- 2000 한국화합물은행 설립
- 2003 화합물 분야 중심 기관 선정 - 연구성과 기탁 등록제 도입 (과기부)
- 2004 화합물 종합정보 관리시스템 구축 (KIMS, PIMS, CIMS, HAMS)
- 2008 화합물 관리·유통 전담기관 선정 (연구성과 전담기관 선정)
- 2010 설립 10주년 기념 심포지엄 개최
- 2014 화합물 저온저장시설 확장, 화합물 관리 자동화장비 구축
  품질관리 장비(UPLC-MS : PDA detector) 구축
- 2015 설립 15주년 기념 심포지엄 개최
- 2017 화합물 관리 자동화 장비 추가 구축 – Master tube 96만종 저장 가능(-20 °C)
- 2018 품질관리 장비(UPLC-MS : PDA, ELS detector) 추가 구축
- 2019 홈페이지 개편(화합물 검색 시스템), UPLC-MS 데이터 자동 수집/변환 관리 시스템 구축
  화합물 65만종 확보, HTS 937과제(누적) 지원
- **2020 설립 20주년 기념 심포지엄 개최, 웹 기반 통합 데이터 플랫폼 서비스**
- 2021~ 국가 핵심 플랫폼 기관 역할, 세계 공공화합물은행

한국화합물은행의 역할 및 임무

역할 및 임무

· **역할**

국내 산재한 화합물을 범국가적으로 확보·관리하여 국내 신약개발 및 바이오 관련 산·학·연에 제공함으로써 공동연구 촉진 및 화합물 활용 가치 극대화

· **임무**

잠재적 무한가치를 갖는 화합물을 범국가적으로 통합 관리하고 공동 활용함으로써 글로벌 신약개발 및 바이오 연구를 지원하는 국가 핵심인프라 구축

· **기탁 화합물을 매개로 산·학·연 기탁기관과 활용기관의 공동연구 중개**

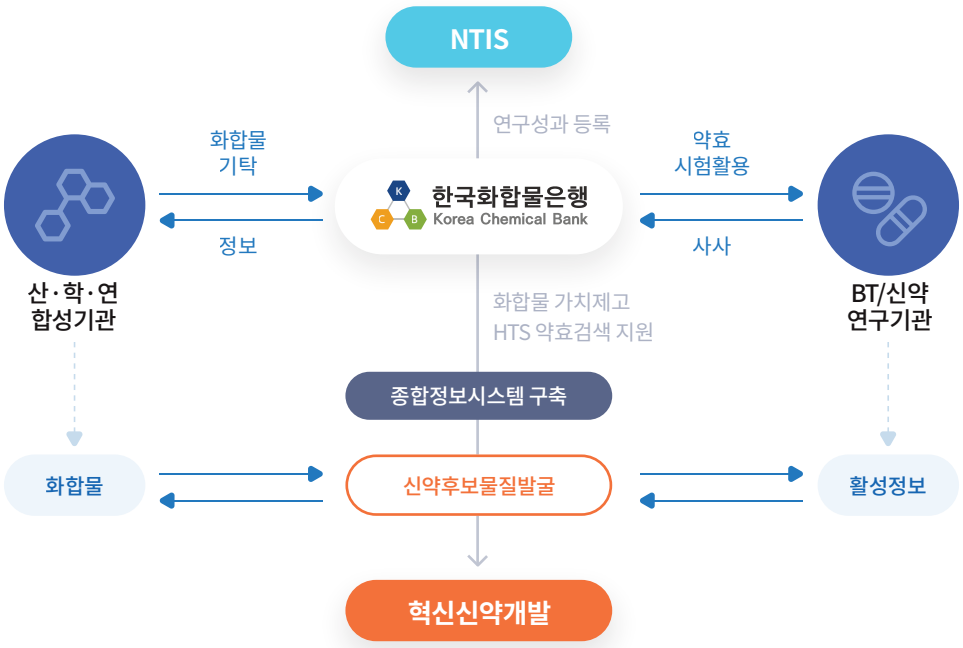
화합물 관리·유통 전담기관

· **화합물 관리·유통 전담기관 지정**

한국화학연구원 한국화합물은행은 국가연구개발 9대 성과 중 화합물 분야 관리·유통 전담기관으로 지정되어 있습니다. (과학기술정보통신부고시 제2019-58호)

· **연구성과 의무기탁**

「국가연구개발사업의 관리 등에 관한 규정」 제 25조 13항에 의하여 국가연구개발사업수행을 통해 창출된 연구성과 중 화합물은 관리·유통 전담기관인 한국화학연구원 한국화합물은행에 의무적으로 기탁하도록 되어 있습니다.



화합물 확보 현황

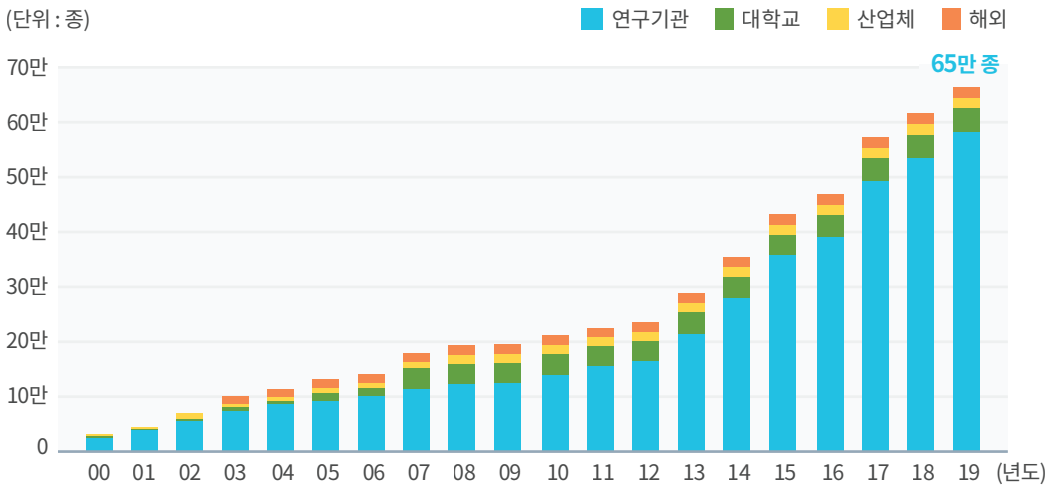
화합물 보유 현황

· **국내·외에서 수집된 65만종(2019년) 신약소재 화합물 보유**
- 신약개발연구 과정에서 창출된 국내 고유 양질의 합성 화합물로 구성
- 생리활성 유기합성 화합물 및 단일성분 천연물로 구성
- 연구성과 기탁, 전문가 위탁합성, 특수골격 구매 등을 통해 화합물 확보

· **650만건 이상의 화합물 활용 데이터 보유**
- 약효, 독성, 약물성 데이터 수집 / 표준화 / 통합 및 관리

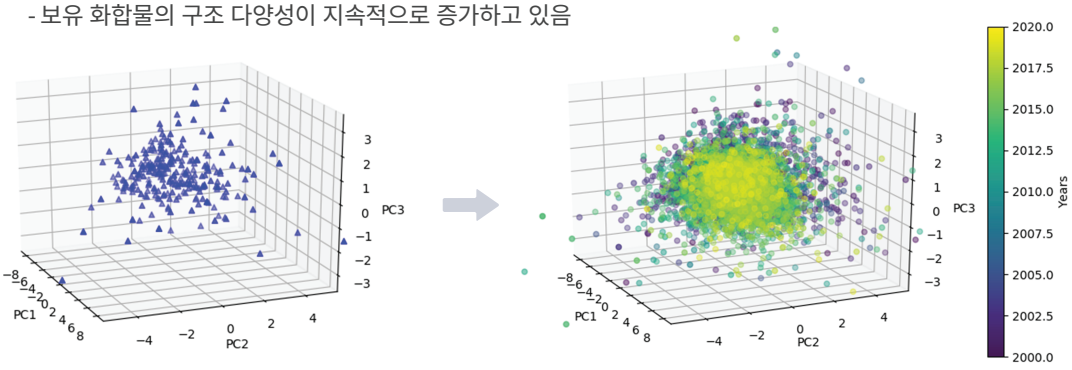
화합물 확보 현황

· **화합물 확보 현황(누적)**



화합물 다양성

· **한국화합물은행 초기(2000년)와 2019년 보유 화합물 다양성 비교**
- 보유 화합물의 구조 다양성이 지속적으로 증가하고 있음



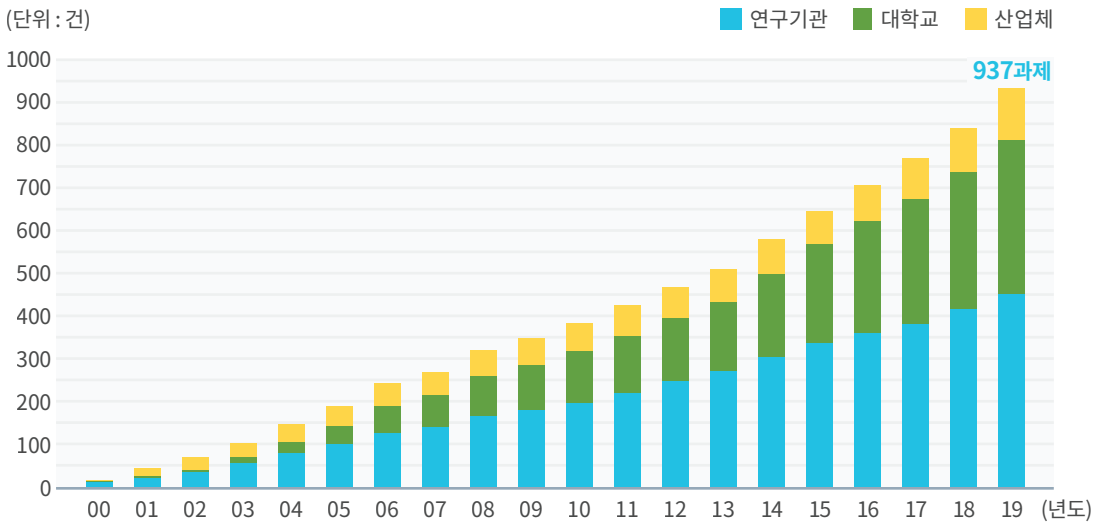
화합물 · 데이터 활용 현황

화합물 활용 현황

· 한국화합물은행 제공 화합물 활용현황

- 매년 국내 산·학·연 평균 200과제 지원(신규 60과제 이상, 누적 937과제)
- 매년 20~40만종 화합물 제공(>1,000개/일, 누적 제공 화합물수 : >870만개)

· 신규 약효시험 활용 현황(누적)



· 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)

데이터 활용 현황

· 산·학·연 맞춤형 데이터 활용 지원(누적26건)

- 65만종 화합물 및 650만건 이상 약효시험 데이터 중 공개가능 정보 제공

년도	인공지능 과제	가상탐색	누적건수
2018	6건	-	6건
2019	4건	16건	20건

신약소재 화합물 및 데이터 공동활용 플랫폼

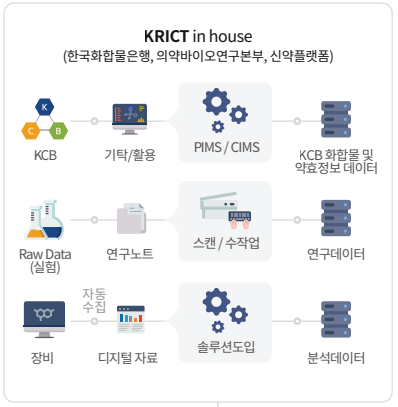
실물 및 정보 자동화 관리 시스템

- 화합물과 데이터 기탁, 활용 및 품질 정보관리 시스템 구축 및 활용
- 바코드 및 물류관리 시스템 기반 화합물 보관 및 자동 선별 시스템 구축
- 화합물 입고/출고, 품질검증, 활용, 약효 평가 결과 등 화합물의 모든 정보를 실시간으로 추적 관리

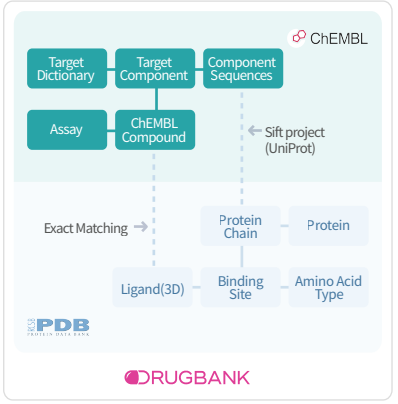
공동활용 통합 데이터 플랫폼 (korea.chembank.org)

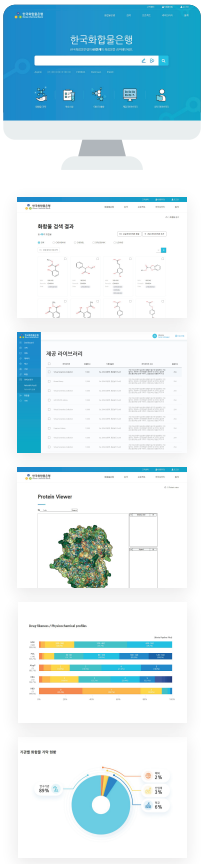
- KCB 화합물 데이터와 외부 공공 데이터가 연계된 통합 데이터베이스 구축
- 신약소재 화합물에 대한 구조/성질/질병/타깃/키워드 통합검색 제공
- 웹 기반 단백질 검색 및 3차원 단백질-리간드 결합 구조 Viewer 제공
- 온라인 화합물 및 데이터 기탁/활용 신청 서비스 제공

한국화합물은행/학교/연구소/기업



Public DB





분자모델링 · 화학정보학 기반 정보 제공

분자모델링 활용 유효물질 발굴지원

가상탐색을 이용한 유효물질발굴

- 리간드 기반 가상탐색 (LBVS)
- 타깃 단백질 기반 가상탐색 (SBVS)
- *In silico* CombiChem을 이용한 가상 라이브러리 DB구축

약물성(ADMET) 예측

- BBB, Caco2, HIA, MDCK 투과 예측
- Water solubility 예측
- CYP450 대사 예측
- 독성 예측

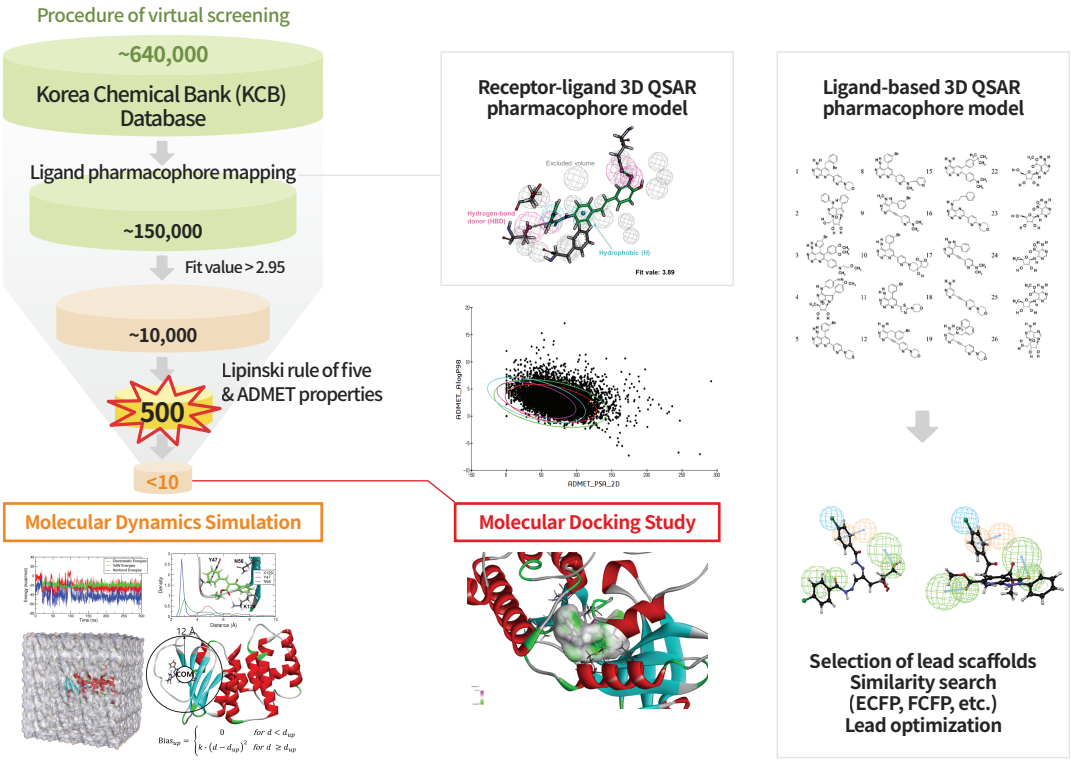
약물 최적화를 위한 분자설계 기술

- 활성화합물의 타깃 단백질 결합 예측 (Docking)
- QSAR을 통한 구조-활성 상관관계 예측
- QSAR모델 개발을 위한 분자표현자 제공

화학정보학/통합정보 시스템 구축

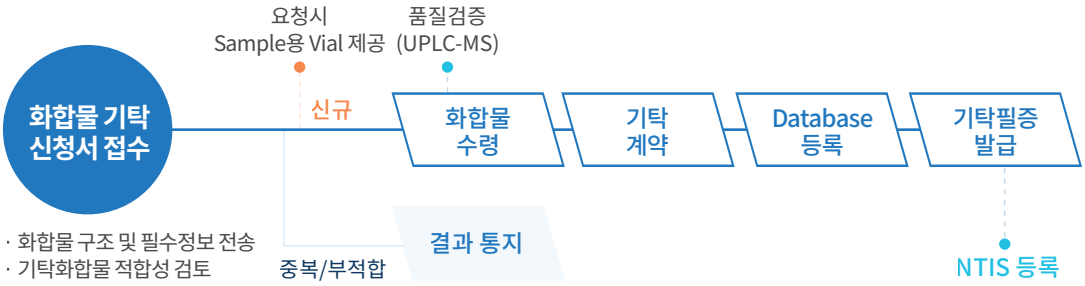
- 약물-표적-질환 정보 DB 구축
- 특정 타깃, 특수 목적 중심 focused 라이브러리 구축
- 개방형 통합화합물정보 플랫폼 구축

분자모델링 지원



화합물 기탁 절차

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



기탁화합물 범위 및 기준

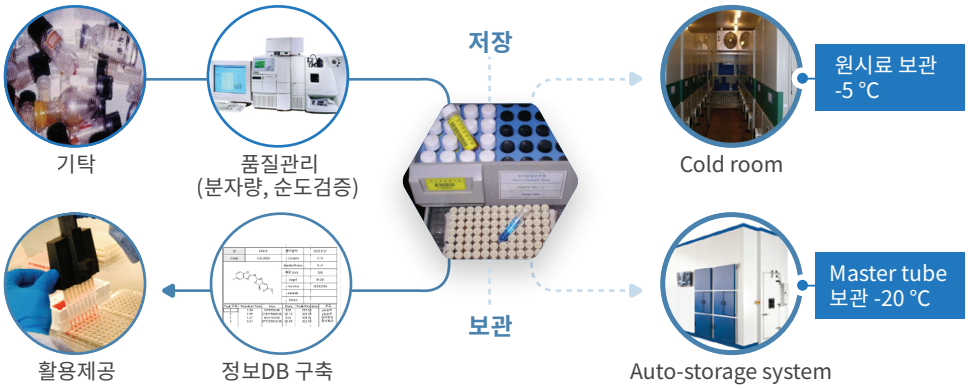
| 범위 유기합성 화합물 및 단일성분 천연물
(기탁화합물의 활성여부와 상관 없음. 최종 화합물 뿐만 아니라 합성 중간체도 기탁 가능)

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

기탁자 혜택

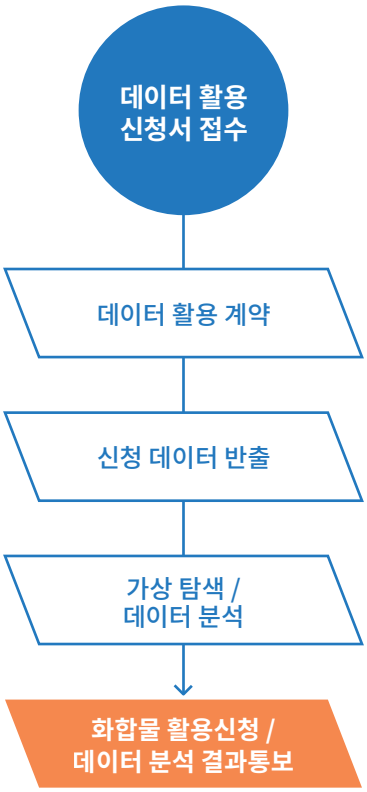
- **기탁화합물에 대한 활용 결과 도출시 그 결과를 통보 받을 수 있다.**
- **기탁화합물의 활용결과 Hit이 도출된 경우**
  - 활용자와 협의하여 후속연구에 공동연구자로 참여할 수 있다.
  - 활용결과를 논문 또는 특허로 출판할 경우: 기탁자의 기여도에 따라 공동저자 또는 공동출원인으로 참여 할 수 있다.
  - 기탁화합물의 활용결과 수익이 발생할 경우: 기탁자의 기여도에 따라 수익의 일부를 분배 받을 수 있다.

화합물 보관 및 관리체계



데이터 활용 절차

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



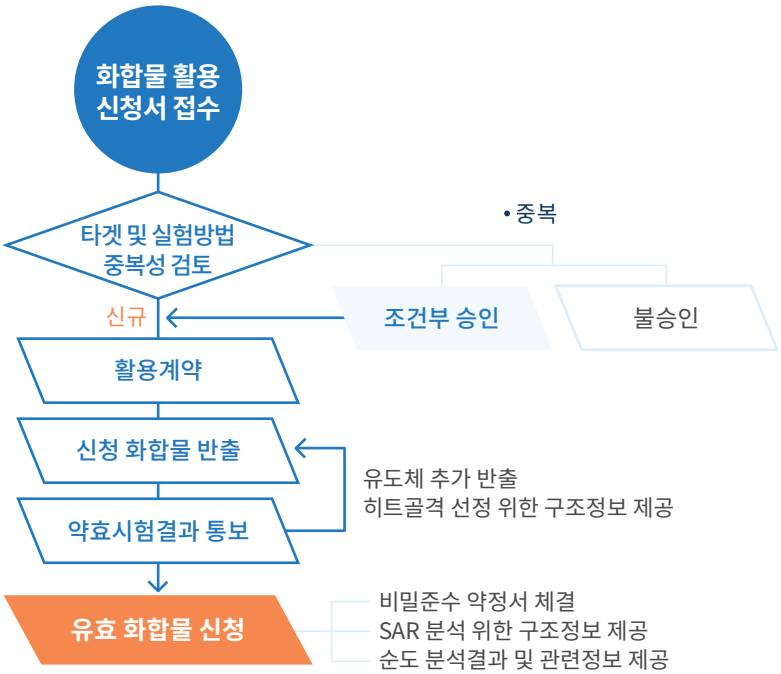
정보제공 데이터 종류

분류	소분류	
화합물 구조 정보	구매화합물 라이브러리	
	Focused 라이브러리	임상 화합물
		GPCR 화합물
		PPI 화합물
	반출 가능한 라이브러리	
	PharmaCore Collection	
약효시험결과 정보	공개 가능한 정보	

· 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



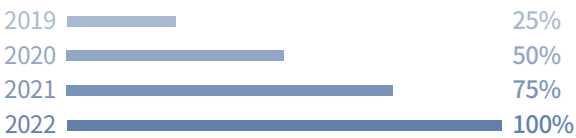
화합물 사용료 규정

· 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

화합물 활용결과 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 포함되는 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)가 취득할 수 있으며, **"물질특허"**를 소지한 기탁자와 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.

* 활용기관은 한국화합물은행의 라이브러리를 활용한 연구결과를 논문, 특허 등에 발표 또는 공개할 경우 "한국화합물은행 제공 화합물을 사용하여 연구가 진행되었다." 는 사사 또는 문구를 기재하여야 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)

화합물 활용 연구성과

화합물 활용도

- 매년 국내 산·학·연 평균 200과제 지원(신규 60과제 이상, 누적 937과제)
- 매년 20~40만종 화합물 제공(누적 870만개 이상 화합물 제공)
- 한국화합물은행 라이브러리 활용하여 발표된 논문(매년 20건 이상)

국가과제 도출 사례

- 한국화합물은행 제공 화합물을 활용한 연구결과를 기반으로 다수의 신약개발 과제 도출(50건 이상 과제화)
  - 21C 프론티어사업 과제, 교과부 중점연구개발과제, 질환중심 신약개발 사업 등
  - 바이오의료기술개발사업 과제, 범부처 신약개발과제, 산업계 수탁사업 등

신약후보물질 도출 기여 사례

2011
지방세포 선택적 형광표지제 개발
- 국내기업 기술이전

2011
신개념 골다공증치료제 후보물질 개발(TAZ)
- 국내기업(신풍제약) 기술이전

2012
비만/당뇨 치료제 후보물질 개발(DGAT1)
- 국내기업(한독약품) 기술이전

2013
녹내장치료제 후보물질 개발
- 국내기업(국제약품) 기술이전

2014
바이러스치료제(HRV) 후보물질 개발
- 다국적제약사(Novartis) 기술이전

2019
B형 간염 치료제 후보물질 개발
- 국내기업 기술이전

2018
대장암 표적 치료 선도물질 개발
- 글로벌 인큐베이터(FutuRx) 기술이전

2017
퇴행성뇌질환 및 암질환 치료제 후보물질 개발
- 국내기업 기술이전

2016
대사질환 치료제 후보물질 개발
- 국내기업 기술이전

2015
항암제 후보물질 개발
- 국내기업 기술이전

신약개발 연구과정 중 한국화합물은행의 역할

- 화합물 활용 지원을 통한 신약개발의 출발점 제공
- 데이터 활용 지원을 통한 신약연구 개발 가속화 및 효율성 제고

※ IND (Investigational New Drug) : 임상시험신청
NDA (New Drug Application) : 신약 허가 신청

제공 라이브러리 종류

전체 Library

화합물 수 : 65만종

· Kinase Library

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

· 천연물 Library

- 화합물 수 1,300
- 라이브러리 구성 단일성분 천연물 및 천연물 유사골격 (Natural Product-like) 구조의 화합물

· Fragment Library

- 화합물 수 1,600
- 라이브러리 구성 분자량 300이하 화합물 라이브러리, Rule of 3 filtering (20 mM in DMSO)

· PharmaCore Collection

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

· 대표 Library

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

· 임상화합물 Library

- 화합물 수 2,800
- 라이브러리 구성 임상 I - III 상 단계 화합물 및 승인 약물 (Clinically applied compounds)

· PPI Library

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

· GPCR Library

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

· 기본 제공량 : 5 uL (DMSO 용액, 평균농도 5 mM)

FAQ Frequently Asked Questions

Q 연구성과(화합물) 기탁제도는 무엇인가요?

연구성과의 체계적인 관리와 공동 활용을 위하여 국가연구개발사업을 통하여 생산된 화합물(유기합성화합물 및 단일 성분 천연물)을 전담기관에 의무적으로 기탁하는 제도입니다. 기탁된 화합물은 전담기관에서 체계적으로 보존·관리되어 국내 산·학·연 신약개발 연구자들이 공동 활용할 수 있도록 지원하는 제도입니다.

Q 화합물은 어디에 어떻게 기탁하나요?

한국화학연구원 한국화합물은행은 화합물 분야 연구성과 관리·유통 전담기관으로 지정되어있습니다.
(과학기술정보통신부고시 제2019-58호) 한국화합물은행(chembank@krict.re.kr)에 연락을 주시면 화합물 보관용 용기(vial, rack)을 보내드립니다. 화합물 기탁이 완료되면 '화합물 기탁필증'을 발급합니다. 이 기탁증서를 과제평가 시 또는 보고서 제출시에 첨부하시면 됩니다.

Q 어떤 화합물을 얼마나 기탁하여야 합니까?

한국화합물은행에서는 신약으로 개발 가능성이 높은 유기합성 화합물 및 단일성분 천연물을 기탁 받고 있습니다. 화합물의 특성에 따라 순도나 양은 크게 문제가 되지 않지만, 가능한 순도 80% 이상 및 10 mg 내외의 화합물을 기탁 받고 있습니다. 천연물의 경우 단일 성분만을 기탁 받습니다.

Q 기탁된 화합물은 어떻게 활용 되나요?

기탁된 화합물은 순도와 분자량을 확인 후 저온 창고에 보관됩니다. 이들 화합물은 약효시험기관의 요청에 의하여 반출되어 주로 특정 질병 작용점에 대한 고효율약효시험(HTS)을 통한 신약 유효물질 발굴에 활용되거나 BT 연구의 유효 화합물 발굴에 활용됩니다.

Q 화합물을 기탁하면 기탁자에게 어떤 혜택이 있나요?

기탁된 화합물은 전담기관에서 체계적으로 관리되어 국내 연구자 누구나 활용할 수 있습니다. 기탁 화합물이 약효시험에 활용되어 활성을 나타내는 경우 활용자와 협의에 의하여 신약개발연구 후속 연구에 참여하거나 상업적 이익이 발생할 경우 이익을 분배 받으실 수 있습니다.

Q 한국화합물은행물 보유 화합물은 어떻게 활용할 수 있나요?

한국화합물은행에 화합물 활용 신청서를 제출하시면 기 수행중인 약효시험과의 중복성을 검토한 후 중복되지 않으면 요청 화합물을 제공 합니다. (화합물 제공량 및 제공방법은 한국화합물은행 홈페이지 참고)

Q 특정 골격의 화합물을 선택하여 약효시험을 수행할 수 있습니까?

한국화합물은행 홈페이지를 통해 화합물을 검색하실 수 있고, 한국화합물은행에 직접 방문하여 화합물 선별을 하실 수 있습니다.

Q 한국화합물은행에서 직접 화합물을 합성하거나 약효시험을 수행합니까?

자체 내에서 화합물을 합성하거나 약효시험을 하지 않습니다.
한국화합물은행은 기탁기관에서 기탁한 화합물을 체계적으로 관리하여 약효시험기관에 제공함으로써 기탁기관과 약효시험기관을 연결시켜주는 역할을 하고 있습니다. 또한 hit 평가 과정에서 필요한 경우 차기 년도에 위탁합성 또는 판매 회사로부터 구매를 고려 할 수 있습니다.

Q 수행중인 약효시험과 동일한 작용점에 대한 약효시험이 다시 신청되는 경우에는 어떻게 됩니까?

동일한 작용점에 대한 약효시험이 신청되면 약효시험 선수행기관의 권리를 보호하기 위하여 화합물 제공을 거절 할 수 있습니다. 단, 약효시험방법이나 약효시험에 제공되는 화합물이 상이하여 서로 다른 hit가 발생할 가능성이 있는 경우 등 예외적인 경우 화합물 제공이 가능합니다.

과학기술정보통신부지정
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]

We take care of your compounds and create new value!

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