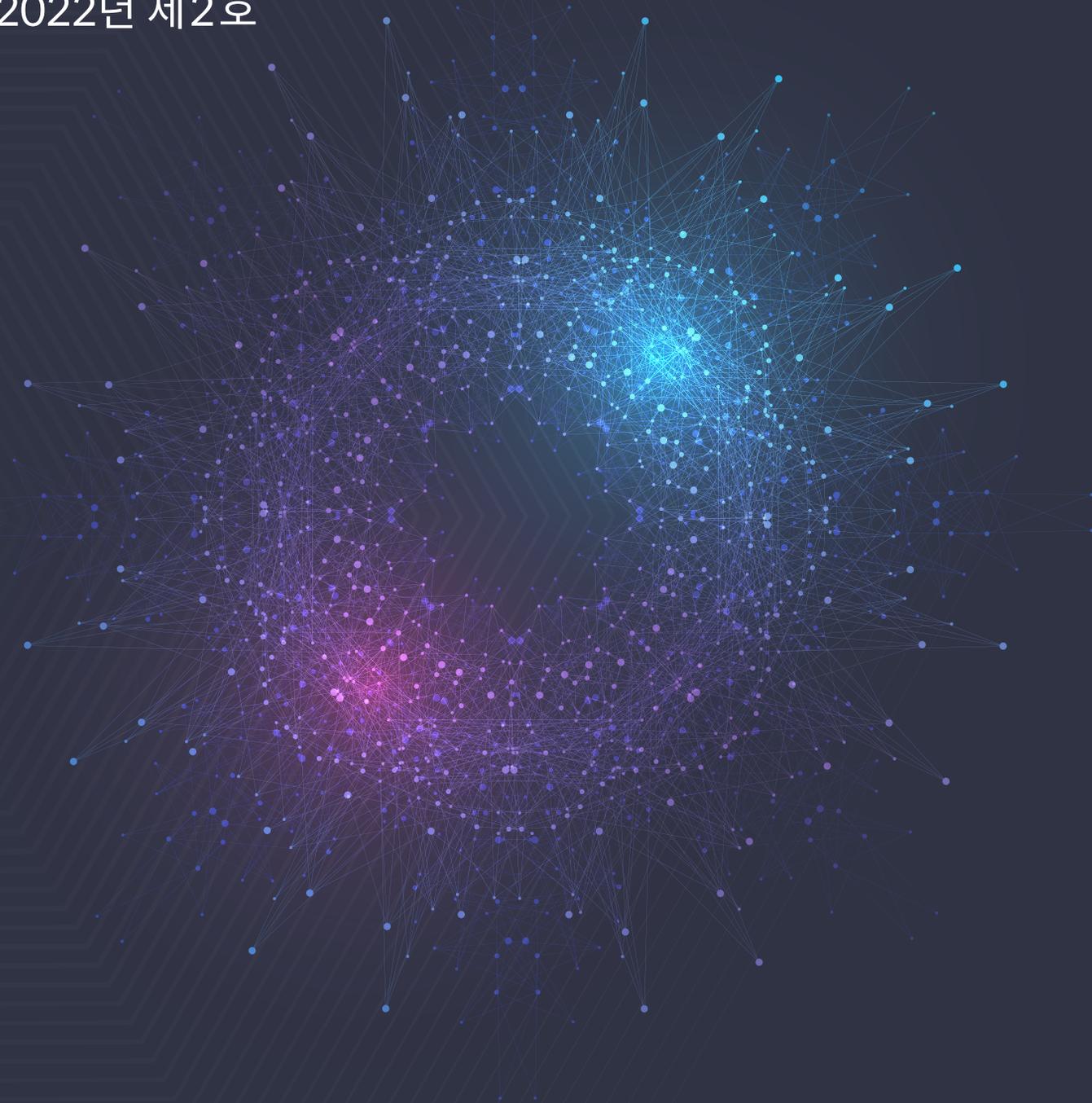




# KCB newsletter

한국화학물은행 뉴스레터

2022년 제2호



# 한국화학물은행 뉴스레터

## 2022 Vol.2

발행일 : 2022년 8월  
발행인 : 이미혜  
편집인 : 이선경  
발행처 : 한국화학물은행

한국화학물은행은 국가연구개발사업의 화학물 연구성과 관리·유통 전담기관으로 지정되어 있습니다.  
[과학기술정보통신부 고시 제2022-41호]

## CONTENTS

한국화학물은행 동정	한국화학물은행 소식	3
	주요방문인사	4
한국화학물은행 사업현황	화학물 확보 현황	5
	데이터 활용 현황	6
	화학물 활용 현황	7
화학물 관리 시스템	한국화학물은행의 라이브러리 수집 및 관리 시스템	13
기고문	<b>인공지능 신약개발 활성화를 위한 한국제약바이오협회 인공지능신약개발지원센터의 역할</b> - 인공지능신약개발지원센터 센터장 / 한국과학기술원(KAIST) 김우연 교수	20
한국화학물은행 사업안내	화학물 기탁 절차	30
	데이터 활용 절차	31
	화학물 활용 절차	32
	제공 화학물의 활용결과(논문, 특허 등)에 대한 권리 관계 규정	33
	후속연구를 위한 화학물 추가합성 및 구매 진행 안내	33
	한국화학물은행 제공 라이브러리 종류	34

## 한국화학물은행 소식

### 생명연구자원 기탁등록보존기관 지정

한국화학연구원 한국화학물은행은 2022년 4월 21일 「생명연구자원의 확보·관리 및 활용에 관한 법률」 제8조에 따라 과학기술정보통신부 소관 생명연구자원의 안정적 확보 및 관리를 지원하기 위하여 생명연구자원 기탁등록보존기관으로 신규 지정되었다.



### 한국화학물은행 Nature 홍보기사 게재

한국화학연구원 한국화학물은행은 국가생명연구자원 화학물 중앙은행으로 Focal Point on Biological Resources in South Korea 특별기획 홍보기사에 소개되었다. (<https://www.nature.com/articles/d42473-022-00019-y>)

### 한국화학물은행 홈페이지 개편

한국화학물은행 홈페이지(<https://www.chembank.org>)를 새롭게 개편하여 가독성을 개선하였다. 상단에 구성된 메뉴탭과 첫 화면 오른쪽의 바로가기 메뉴에서 화학물 기탁, 화학물 활용, 데이터 활용 절차와 양식의 빠른 확인이 가능하다. 한국화학물은행의 소개 및 현황, 공지사항의 안내와 관련 정보를 제공한다.

### 통합데이터플랫폼 약효/데이터 프로젝트 서비스 오픈

한국화학물은행의 통합데이터플랫폼(<https://korea.chembank.org>)은 약효 및 데이터 프로젝트의 신규 신청기능을 10월에 제공할 계획이다. 기존 구축된 시스템을 고도화하고 소스코드 보안을 강화하였다. 10월 한달 동안은 이메일 및 웹에서 프로젝트 신청이 모두 가능하고, 이후에는 웹 신청을 권장한다.

### 한국화학물은행 2022년 제1회 자문위원회 개최

2022년 6월 28일 한국화학연구원 디딤돌플라자에서 한국화학물은행의 2022년 상반기 자문위원회가 진행되었다. 자문위원들의 한국화학물은행 운영 및 발전방안에 대한 의견을 수렴하여 한국화학물은행 운영에 반영할 계획이다.

## 주요방문인사

No	방문일자	방문기관
1	2022.01.04	과학기술정책연구원 이광호 선임연구위원 외 1인
2	2022.01.05	(주)버추얼랩 이민호 대표이사 외 1인
3	2022.01.27	(주)글라세움 박형순 연구소장, 건국대학교병원 정혜원 교수
4	2022.02.21	대구경북과학기술원 구재형 교수
5	2022.03.04	라이트펀드 손명세 이사장, 김한이 대표이사
6	2022.04.08	인하대학교 의과대학 이재선 교수
7	2022.04.11	Cyrus Therapeutics
8	2022.04.13	국가과학기술연구회 김복철 이사장
9	2022.04.20	KAIST 교육과정(정부부처 과장급 인사 15인)
10	2022.04.26	특허청 조호정 수석심사관, 신귀임 기술서기관
11	2022.05.04	KISTEP 성과확산센터 김행미 부연구위원, 김준희 부연구위원
12	2022.06.20	(주)오씨아드 김진한 연구소장 외 1인
13	2022.06.23	강원대학교 윤장원 교수



과학기술정책연구원



(주)글라세움



대구경북과학기술원



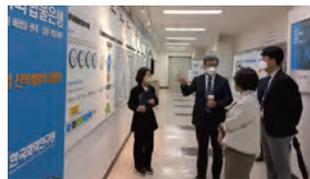
라이트펀드



인하대학교



Cyrus Therapeutics



국가과학기술연구회



KAIST



특허청



KISTEP



(주)오씨아드



강원대학교

## 화합물 확보 현황

한국화학물은행은 2022년 6월 30일 기준 73만종 이상의 화합물을 보유하고 있으며 다양성, 약물성, 독창성이 우수한 고수준 신약 소재 화합물 라이브러리를 제공하기 위하여 다양한 방법으로 우수한 화합물을 확보하고 있다.

### 1 연구성과 기탁[법적의무 기탁]

「국가연구개발사업 등의 성과평가 및 성과관리에 관한 법률」 제26조 및 연구성과 평가법 시행령 제27조에 따라 국가연구개발 사업 수행을 통해 창출된 화합물은 연구성과 관리·유통 전담기관인 한국화학연구원 한국화학물은행에 의무적으로 기탁하도록 되어 있다. 연구성과 기탁 효율제고를 위하여 2017년부터 국가연구 과제 및 사업평가에 연구성과 기탁실적을 반영하고, 전담 기관에 기탁된 성과만 인정하도록 “국가연구개발 과제평가 표준지침”이 개정되었다.

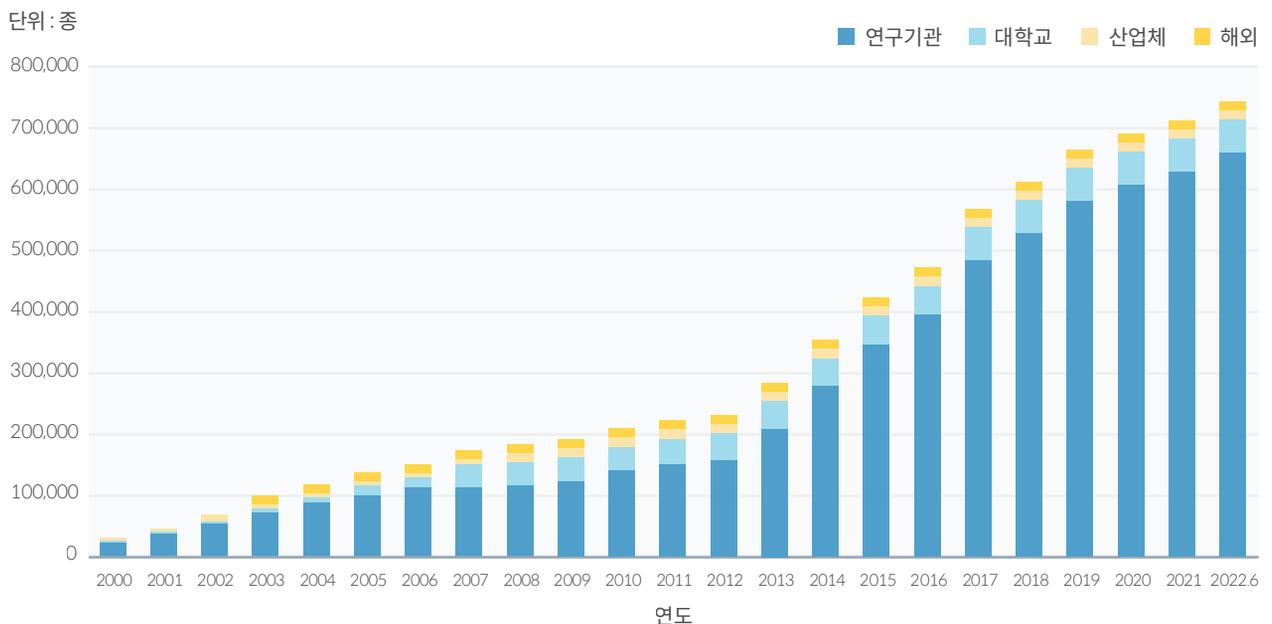
### 2 국내 전문가 공모 위탁합성

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 2021년까지 누적 17,200여종을 확보하였다. 2022년에도 14개 과제를 선정하여 1,500여종의 화합물을 확보 중이다.

### 3 특수 골격 화합물 해외 구매

단순 기탁만으로 충족하기 어려운 화합물 다양성을 신속하게 확보하기 위하여 화학정보학 및 분자모델링 기술을 활용하여 약물성 및 다양성 극대화를 고려한 특수 골격 화합물을 해외 vendor로부터 선별하여 구매, 확보하고 있다. 2022년에도 가치가 높은 라이브러리를 지속적으로 확보하여 연구자들에게 제공할 예정이다.

화합물 확보 누계 현황 (2000 ~ 2022.06.30) 73만종 보유



## 데이터 활용 현황

한국화학물은행은 2018년부터 화합물 구조 및 공개 가능한 약효시험 데이터 정보를 제공하고 있다. 2022년 상반기에는 산업체 8건을 포함하여 19개 기관에 데이터를 제공하였다. 정보 제공 서비스 건수도 지속적으로 증가하고 있으며, 임상, 천연물 정보 외에도 세포독성 및 대사안정성 데이터(KCB 생산데이터), Drug-likeness(계산 데이터)등도 연구자들에게 제공하고 있다.

### I 데이터 지원 현황

분류	소분류	2018-21년	2022년 6월	
화합물 구조 정보	전체(분양 가능) 라이브러리	56건	14건	
	구매화합물 라이브러리	42건	9건	
	Focused 라이브러리	대표 라이브러리	13건	8건
		임상화합물 라이브러리	32건	7건
		천연물 라이브러리	18건	7건
		Fragment 라이브러리	17건	6건
		Kinase 라이브러리	-	4건
		PPI 라이브러리	27건	8건
		GPCR 라이브러리	25건	6건
	PharmaCore Collection	4건	1건	
약효시험결과 정보	공개 가능한 정보	35건	6건	

### I 정보 제공 현황

정보 종류	산업체		대학교		연구기관	
	횟수	개수	횟수	개수	횟수	개수
Hit 구조정보 및 분석 보고서	1	28	7	16	2	41
SAR 분석 구조 정보	31	1,643	37	5,558	44	2,589
임상화합물 정보	10	174	11	65	11	283
천연물 정보	4	13	12	1,300	5	297
세포독성(KCB 생산 데이터)	3	14	9	156	2	89
대사안정성(KCB 생산 데이터)	3	13	8	57	2	86
Drug-likeness (계산 데이터)	1	28	-	-	-	-



## 화합물 활용 현황

매년 60건 이상의 신규 작용점에 대하여 20만개 이상의 화합물이 국내 산·학·연에 제공되어 활용되고 있다. 2019년부터 신규 과제 활용 건수 및 화합물의 활용도가 급격하게 증가하였다. 신규과제 건수가 2020년 105건, 2021년 116건, 2022년 상반기 73건으로써 지속적으로 상승하고 있다. 활용 과제 건수가 늘어나면서 분양 화합물 수도 2020년 47만개, 2021년 49만개, 2022년 상반기 65만개 이상으로 증가되었다. 2022년 상반기 신규과제 활용은 73건이며, 이중 산업체 30건(41%), 대학교 22건(30%), 연구기관 21건(29%) 이었다. 2022년 6월까지 KCB 제공 화합물 활용 누적 과제수는 1,231건이다.

### I 최근 4년간 화합물 활용 현황

년도	활용과제 건수		화합물 분양 횟수		분양 화합물 개수	
	전체과제	신규과제	전체과제	신규과제	전체과제	신규과제
2019	188건	97건	306회	185회	239,034개	206,980개
2020	223건	105건	414회	254회	479,332개	423,120개
2021	213건	116건	387회	238회	491,985개	340,996개
2022.06.30	137건	73건	246회	103회	650,939개	132,855개

· 2022년(상반기) : 246회에 걸쳐 총 650,939개 화합물 분양(평균 5,424개/일)

### I 화합물 활용 지원의 경제적 가치평가(2021년)

- 49만개 x 4만원 = **196 억원 수입대체효과**(Chemdiv 2020년 최저 구매가격 \$37/개)
- 국내 고유 화합물은 구입 불가능 → 가치 산정 어려움

### I 기관별 화합물 활용 현황

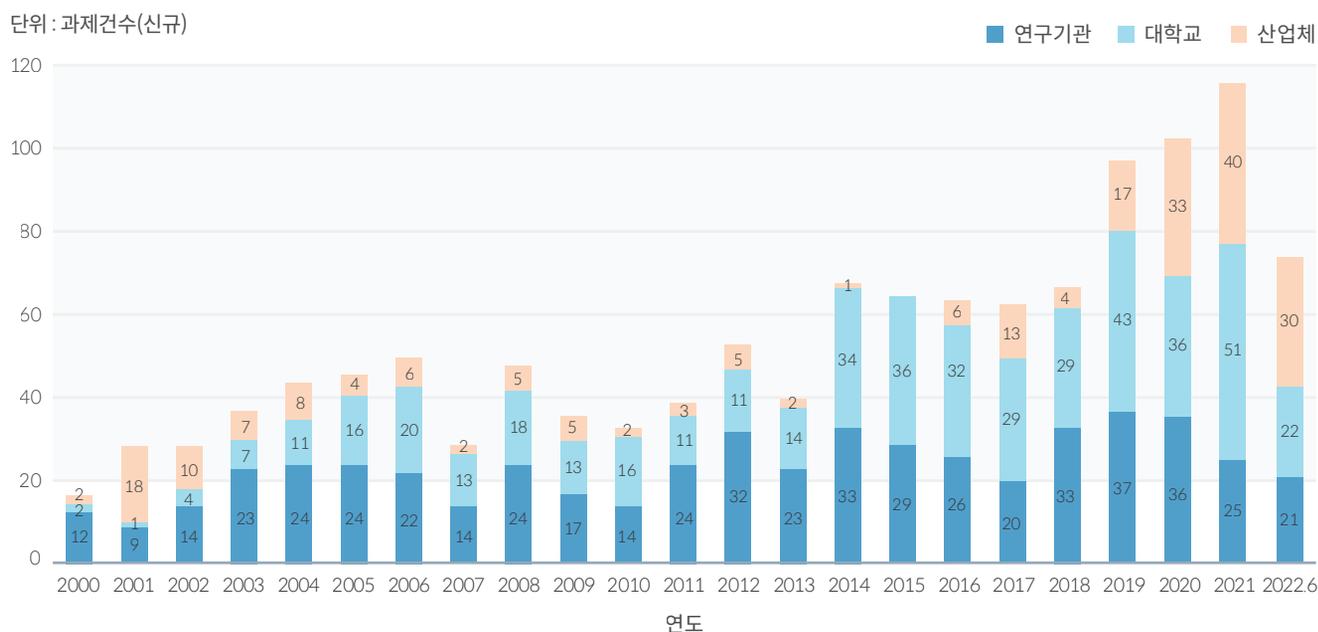
(신규과제건수)

년도	2019	2020	2021	2022.06.30
연구기관	37	36	25	21
산업체	17	33	40	30
대학교	43	36	51	22
계	97	105	116	73

2018년 하반기부터는 전체 분양가능한 화합물 라이브러리의 구조정보를 포함하여 활용자의 동의를 얻은 약효정보 등 한국화합물 은행이 보유하고 있는 데이터를 연구자들에게 제공하고 있다.

데이터 기반의 화합물 선별이 증가하고 있으며, 특히 산업체의 경우에는 제공받은 데이터 기반으로 최적의 화합물 선별과 지식재산권 확보 전략을 수립할 수 있으므로 데이터 활용 지원 사업 확대 이후에 산업체의 활용이 증가된 것으로 사료된다.

## 화합물 신규 활용 현황 (2000~2022.06.30)



## I 화합물 분양 현황

분류	분양 화합물 종류	분양 화합물 수(개)	
화합물은행 분양 현황	Pre-made set	148,878	
	Cherry-picking	일반 분양	474,473
		Active compound (AC)	24,308
		Active derivative (AD)	2,529
		Hit compound (HC)	44
		Hit derivative (HD)	707
	소계	502,061	
총계	650,939		

2022년 상반기 분양된 화합물은 총 650,939개였다. 사전제작(Pre-made) 라이브러리 화합물은 148,878개 분양되었고, 자동선별(cherry-picking) 화합물은 502,061개 분양되었으며, 그 중 active compound (AC) 화합물 24,308개, active derivative (AD) 화합물 2,529개, hit compound (HC) 화합물 44개, hit derivative (HD) 화합물 707개가 분양되었다.

## I 사전제작(Pre-made) 라이브러리 분양 현황

Pre-made 라이브러리의 제작 목적은 사용자의 활용 편의를 위하여 사용목적별로 focused library를 구축하여 활용자의 요구를 충족하는 화합물을 신속하게 제공하는 것이다. 다수의 plate를 한번에 제작함으로써, freeze-thaw cycle의 반복에 따른 용해도 감소나 화합물의 변질 등을 최소화할 수 있는 장점이 있다. 2022년 상반기에는 대표화합물 10건, 임상화합물 10건, 천연물 9건, Fragment 1건, Kinase 6건, GPCR 2건의 pre-made set이 분양되었다.

							* 분양수(Set)
Plate 종류	대표	임상	천연물	Fragment	Kinase	PPI	GPCR
96-well	8	10	7	1	4	-	2
384-well	2	-	2	-	2	-	-

2022년 2월부터는 활용도가 높은 대표 라이브러리가 약물성 및 다양성을 기반으로 새롭게 구성되어 KCB 활용자들에게 제공되고 있다. 한국화학물은행은 화학정보학 역량을 집중하고 수요자의 의견과 전문가의 자문을 적극 수용하여 pre-made set의 질적 개선을 위해 지속적으로 노력할 것이다.

## I 화합물 활용 신규 과제 현황

구분	현황
스크리닝 type	Target 기반 스크리닝: 48건 Function 기반 스크리닝: 25건
표적 질환	암(32건), 면역/염증(12건), 감염병(5건, COVID-19 2건 포함), 신경계(5건), 대사질환(1건), 심혈관계(1건), 기타(17건)

2022년 상반기 신규 약효시험 활용과제는 Target 기반 스크리닝과 Function 기반 스크리닝이 각각 48건과 25건으로 약 2:1의 비율을 나타냈다. 여전히 항암제 연구가 32건으로 가장 많았고, 면역/염증 치료제 연구가 12건이었다. 감염병 치료제 연구는 5건 이고 이 중 COVID-19 연구가 2건 포함되었다. 신경계 연구 5건, 대사질환과 심혈관계 연구가 각각 1건이었다.

한국화학물은행은 화합물 활용 과제들을 다각적으로 분석하여 수요자의 요구에 맞는 화학정보학 전문 지원을 통해 화합물 선별 서비스를 제공하고 있다.

구분	현황
화합물 선별 전문 지원	화학정보학/분자모델링 전문지원(84건) - Pharmacophore model 기반 가상 탐색: 15건 - 분자도킹 결합모드 분석: 23건 - HIT 유도체 탐색 지원: 9건 - 질병/기전/타깃클래스별 선별 지원: 2건 - Homology model 구축: 5건 - SAR 분석: 1건 - 분자동역학 모의실험: 1건 - 화합물 선정: 28건

## I 화합물 활용 신규 과제 현황(상반기 73건)

약효시험명	구분	적용질환
***를 활용한 타겟단백질 스크리닝	산업체	항암제
in vitro *** 활성 평가	산업체	항암제
*** 상호작용 저해 hit compound 발굴	연구기관	항암제
*** 활용한 항암제 병용투여 후보물질 선정을 위한 천연물질 검색	대학교	항암제
*** 변위 검색법	산업체	기타
*** 저해실험	연구기관	감염증
*** 효소 및 *** 증식 저해에 관한 실험	산업체	항암제
*** 발굴	연구기관	항생제
*** 내성 균주의 항생제 후보 물질 탐색	대학교	항생제
*** 활성 보조효과 시험	연구기관	항균제
*** 표적하는 *** 억제제 라이브러리 스크리닝	산업체	항암제
*** 항바이러스 약효평가	연구기관	바이러스
*** 수용체 대항제 후보물질 발굴	연구기관	신경계
*** 조절 천연물질 발굴	대학교	신경계
*** 표적하는 *** 억제제 라이브러리 스크리닝	산업체	항암제
새로운 *** 작용제에 의한 활성화 시험	대학교	면역
***균 대상 독소 생성 저해 실험	대학교	살균제
새로운 *** 길항제 후보물질 탐색	대학교	면역
*** 효소의 *** 조절 화합물 스크리닝	산업체	항암제
*** 결합 및 조절 화합물 스크리닝	산업체	항암제, 면역
*** 신호 활성 억제를 통한 피부건선 개선 물질 발굴	산업체	염증
*** 질환 효과 시험	산업체	대사질환
*** 타겟 저해제 스크리닝	산업체	항암제
*** 발굴을 위한 *** 라이브러리 스크리닝	연구기관	살균제
*** 저해제	산업체	기타
*** 억제하는 천연물 발굴	대학교	기타
*** hit compound 발굴	연구기관	염증

약효시험명	구분	적용질환
*** 표적하는 *** 억제제 라이브러리 스크리닝	산업체	항암제
*** 과발현 암세포에서의 합성 치사 약물 스크리닝	대학교	항암제
*** 저해제	연구기관	항암제
*** 효소 결합 및 조절 화합물 스크리닝	산업체	염증
*** 활용한 항암제 병용투여 후보물질 선정을 위한 천연물질 검색	대학교	항암제
***과 *** 결합 저해제	대학교	심혈관계
*** 항생제 활성화 물질 검색	대학교	항생제
*** 재생 효능	산업체	신경계
*** 표적하는 *** 억제제 라이브러리 스크리닝	산업체	항암제
*** 기반 *** 화합물 선별	산업체	항암제, 면역
*** 표적 ***기반 화합물 개발	대학교	염증
*** 효소 저해제 화합물 스크리닝	산업체	항암제
*** 표적하는 *** 억제제 라이브러리 스크리닝	산업체	항암제
*** 저해제	연구기관	항암제
***에 결합하는 소형화합물 선별	대학교	항암제
*** 효소 활성 저해제 스크리닝	산업체	항암제
*** 유도 화합물 스크리닝	대학교	신경계
*** 치료제	산업체	염증
*** 안정성시험	연구기관	기타
*** 균에 의한 염증반응 억제효능 화합물 스크리닝	대학교	염증
*** 저항 신장암에서 *** 억제 약물효능 확인	산업체	항암제
*** 위한 화합물 스크리닝	대학교	항암제
*** 세포모델 효력시험	연구기관	신경계
*** 표적하는 *** 억제제 라이브러리 스크리닝	산업체	항암제
*** 단백질과의 결합친화도 측정	산업체	염증
*** 표적하는 *** 억제제 라이브러리 스크리닝	산업체	항암제
*** 저해제를 검색하여 유효물질 발굴	연구기관	감염증

약효시험명	구분	적용질환	약효시험명	구분	적용질환
*** 복제 억제물질 발굴	대학교	감염증	*** 선도물질 발굴	연구기관	항균제
*** 면역관문 억제제	산업체	항암제	*** 항생물질 발굴	연구기관	감염증
*** PPI 저해능 확인	산업체	항암제	*** 억제	연구기관	염증
*** 질병 예방물질 발굴	대학교	항균제	*** 항균 효과를 지니는 유효물질 발굴	연구기관	감염증
*** 효소 억제제 도출	연구기관	항암제	*** 선도물질 발굴	연구기관	기타
*** 세포를 활성화 시키는 신규 물질 발굴	산업체	항암제, 면역	*** 항체 유래 염증 반응 억제 화합물 검색	연구기관	염증
*** 표적하는 *** 억제제 라이브러리 스크리닝	산업체	항암제	*** 활성억제를 타겟으로 한 치료물질 발굴	대학교	염증
*** 표적하는 *** 억제제 라이브러리 스크리닝	산업체	항암제	*** 유전자 활성화인자 스크리닝	대학교	항생제
*** 활성화 물질 탐색	대학교	항암제	*** 효율 증대 화합물 스크리닝	연구기관	기타
*** 형성을 조절하는 전사 조절자 ***의 inhibitor 개발	대학교	항생제			

## I 활용 논문(상반기 15건)

한국화학물은행 제공 화합물 라이브러리를 활용하여 발표된 논문 목록

No	논문명	저자	저널
1	Discovery of Mycobacterium tuberculosis Rv3364c-Derived Small Molecules as Potential Therapeutic Agents to Target SNX9 for Sepsis	Daeun Lee, Eunbi Lee, Sein Jang, Kyungmin Kim, Euni Cho, Seok-Jun Mun, Wooic Son, Hye-In Jeon, Hyo Keun Kim, Young Jin Jeong, Yuno Lee, Ji Eun Oh, Hye Hyun Yoo, Youngbok Lee, Sun-Joon Min,* and Chul-Su Yang*	<i>Journal of Medicinal Chemistry</i> <b>2022</b> , 65, 386-408
2	Discovery of a dual-action small molecule that improves neuropathological features of Alzheimer's disease mice	Min Hee Park, Kang Ho Park, Byung Jo Choi, Wan Hui Han, Hee Ji Yoon, Hye Yoon Jung, Jihoon Leed, Im-Sook Song, Dong Yu Lim, Min-Koo Choi* , Yang-Ha Lee, Cheol-Min Park, Ming Wang, Jihoon Jo, Hee-Jin Kim*, Seung Hyun Kim*, Edward H. Schuchman, Hee Kyung Jin and Jae-sung Bae	<i>PNAS</i> <b>2022</b> , 119(3), e2115082119
3	Discovery of substituted indole derivatives as allosteric inhibitors of m6A-RNA methyltransferase, METTL3-14 complex	Je-Heon Lee, Subin Kim, Mi Sun Jin, Yong-Chul Kim*	<i>DRUG DEVELOPMENT RESEARCH</i> <b>2022</b> , 83, 783-799
4	Synthesis and Structure–Activity Relationship Studies of Benzimidazole-4,7-dione-Based P2X3 Receptor Antagonists as Novel Anti-Nociceptive Agents	Jinsu Bae, Yeo-Ok Kim, Xuehao Han, Myung-Ha Yoon, Woong-Mo Kim,* and Yong-Chul Kim*	<i>Molecules</i> <b>2022</b> , 27, 1377
5	Development of in vitro three-dimensional drug screening system for obesity-related metabolic syndrome	Kyoung Jin Choi, Joon Ho Lee, Sung Bum Park, Yoon-Ju Na, Won Hoon Jung ,Hyuk Lee*, Ki Young Kim*	<i>Journal of Pharmacological Sciences</i> <b>2022</b> , 148(4), 377-386

No	논문명	저자	저널
6	Identification and New Indication of Melanin-Concentrating Hormone Receptor 1 (MCHR1) Antagonist Derived from Machine Learning and Transcriptome-Based Drug Repositioning Approaches	Gyutae Lim, Ka Young You, Jeong Hyun Lee, Moon Kook Jeon, Byung Ho Lee, Jae Yong Ryu* and Kwang-Seok Oh*	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> <b>2022</b> , 23(7), 3807
7	Discovery and synthesis of 1,2,4-oxadiazole derivatives as novel inhibitors of Zika, dengue, Japanese encephalitis, and classical swine fever virus infections	Sangwoo Nam, Hyo Gyeong Na, Eun Hye Oh, Eunhye Jung, Yeon Hee Lee, Eun Ju Jeong, Yu-Da Ou, Bin Zhou, Sunjoo Ahn, Jin Soo Shin, Soo Bong Han* & Yun Young Go*	<i>Archives of Pharmacal Research</i> <b>2022</b> , 45, 280-293
8	Celastrol suppresses the growth of vestibular schwannoma in mice by promoting the degradation of $\beta$ -catenin	Na Hui Kim, Minji Kwon, Jiwoo Jung, Hyo Byeong Chae, Jiwoo Lee, Yeo-Jun Yoon, In Seok Moon, Ho K. Lee, Wan Namkung, Konstantina M. Stankovic, Se A. Lee, Jong Dae Lee* & Sin-Aye Park*	<i>Acta Pharmacologica Sinica</i> <b>2022</b>
9	Discovery of harmalanium halides as anti-ovarian cancer agents	Yunha Choi, Sang Hee Ji, Vineet Patil, Eun Hye Kim, Hoyeong Park, Seong Hwan Kim*, Pilho Kim*	<i>Bulletin of the Korean Chemical Society</i> <b>2022</b> , 43(4), 559-563
10	Eltrombopag as an Allosteric Inhibitor of the METTL3-14 Complex Affecting the m6A Methylation of RNA in Acute Myeloid Leukemia Cells	Je-Heon Lee, Namjeong Choi, Subin Kim, Mi Sun Jin*, Haihong Shen* and Yong-Chul Kim*	<i>Pharmaceuticals</i> <b>2022</b> , 15(4), 440
11	Discovery and characterization of a potent activator of the BKCa channel that relieves overactive bladder syndrome in rats	Heeji Jo, Eun Jung Bae, Narasaem Lee, Jae Won Kwon, Suhan Cho, Sung Joon Kim, Jin Hee Ahn, Chul-Seung Park*	<i>European Journal of Pharmacology</i> <b>2022</b> , 927, 175055
12	BayeshERG: a robust, reliable and interpretable deep learning model for predicting hERG channel blockers	Hyunho Kim, Minsu Park, Ingoo Lee, Hojung Nam*	<i>Briefings in Bioinformatics</i> <b>2022</b> , 23(4), bbac211
13	Novel Thioxothiazolo[3,4-a]quinazolin-5(4H)-one Derivatives as BKCa Channel Activators for Urinary Incontinence	Eun Jung Bae, Heeji Jo, Seong Soon Kim, Dae-Seop Shin, Jung Yoon Yang, Myung Ae Bae, Pyeonghwa Jeong, Chul-Seung Park*, and Jin Hee Ahn*	<i>ACS Medicinal Chemistry Letters</i> <b>2022</b> , online
14	AIMP2-DX2 provides therapeutic interface to control KRAS-driven tumorigenesis	Dae Gyu Kim, Yongseok Choi, Yuno Lee, Semi Lim, Jiwon Kong, JaeHa Song, Younah Roh, Dipesh S. Harmalkar, Kwanshik Lee, Ja-il Goo, Hye Young Cho, Ameerq Ul Mushtaq, Jihye Lee, Song Hwa Park, Doyeun Kim, Byung Soh Min, Kang Young Lee, Young Ho Jeon, Sunkyung Lee, Kyeong Lee* & Sunghoon Kim*	<i>Nature Communications</i> <b>2022</b> , 13:2572
15	AI-based prediction of new binding site and virtual screening for the discovery of novel P2X3 receptor antagonists	Koon Mook Kang, Ingoo Lee, Hojung Nam*, Yong-Chul Kim*	<i>European Journal of Medicinal Chemistry</i> <b>2022</b> , online

## 화합물 관리 시스템

### I 한국화학물은행(KCB)의 라이브러리 수집 및 관리 시스템

한국화학물은행(KCB)은 73만종 이상의(2022.06.30) 신약소재 화합물을 수집, 관리하고 있으며 분양을 통해 국내 신약개발 및 바이오 연구를 지원하고 있다. 대규모의 고품질 화합물을 공동으로 활용하는 플랫폼의 유지·관리는 눈에 보이지 않는 많은 작업과 노력을 필요로 한다.

#### 화합물 수집

##### 1. 수집 화합물의 종류

KCB는 신약 및 바이오 연구지원이 목적으로 유기합성 화합물과 단일성분 천연물을 수집하고 있으며, 향후 올리고 핵산 또는 저분자 펩타이드 등으로 확대할 계획이다. 무기물, 금속 화합물, 상온에서 불안정한 화합물, 물 또는 빛에 민감한 화합물, DMSO에 녹지 않거나 DMSO와 반응하는 화합물 등은 수집에서 제외된다.

##### 2. 수집 화합물의 양

화합물은 다른 바이오 연구 소재와 달리, 복제가 되지 않는 특징 때문에 가능하면 10 mg 이상의 기탁을 권장한다. 단일 농도의 스크리닝에 일반적으로 5 mM DMSO 용액 5  $\mu$ L를 분양하므로 이 경우 분자량이 400 이라면 10  $\mu$ g을 ( $400 \mu\text{g}/\mu\text{mol} * 5 \mu\text{mol}/1000 \mu\text{L} * 5 \mu\text{L}$ ) 제공한다. 10 mg으로는 1,000회 사용이 가능하며, 분자량이 크면 사용횟수는 줄어들고, 농도별 실험을 위해 5~6 배의 양이 제공되면 재고량 소모가 크다. 초기 단일농도 스크리닝을 200  $\mu$ L 규모로 20  $\mu$ M 농도에서 진행한다면, 분자량이 400일 경우 5 mM DMSO 용액은 0.8  $\mu$ L가 ( $5 \text{ mM} * X \mu\text{L} = 20 \mu\text{M} * 200 \mu\text{L}$ ) 필요로 된다.

제공된 5 mM의 5  $\mu$ L는 실험 조건에 따라 차이가 있지만 일반적으로는 triplet 실험을 2번 이상 수행할 수 있는 충분한 양이다. 합성 화합물 하나하나에 합성 연구자의 많은 시간과 노력이 들어가 있으므로 예비 실험을 통해 재현성과 신뢰성을 확보한 후 스크리닝을 진행할 필요성이 있다.

##### 3. 화합물 수집 및 확보 방법

###### 1) 연구성과 기탁

KCB는 화합물 연구성과 관리·유통 전담기관으로서(과학기술정보통신부 고시 제2022-41호) 국가 연구개발 사업으로 창출된 연구 성과 화합물들을 기탁받고 있다. 또한 생명연구자원 신약소재 화합물의 기탁등록보존기관으로 지정되어 있다. 연구성과는 해외에서는 얻을 수 없는 독창적 화합물들이 다수 포함되어 있어서 국가의 가장 중요한 연구 자산중의 하나이다.

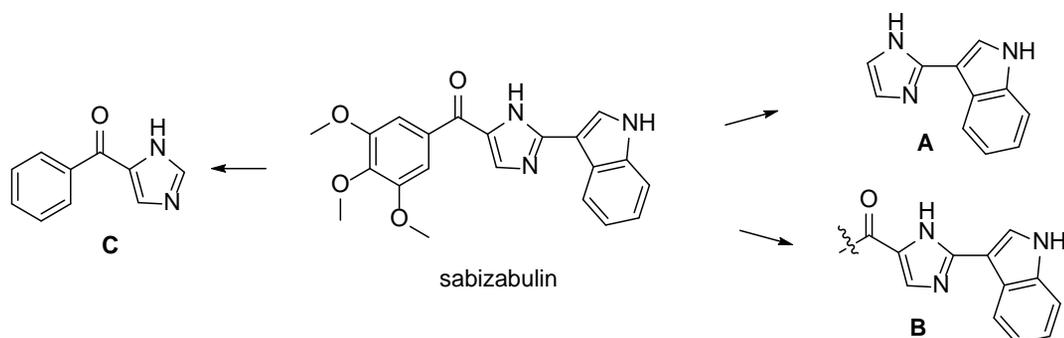
###### 2) 국내 전문가 대상 위탁합성 공모

매년 국내 합성 전문가를 대상으로 공모를 통해 신청과제의 구조 적합성(약물성 및 독창성)과 중복성 등을 평가하여 위탁합성 과제를 선정한다. 위탁합성 과제로부터 확보한 고부가 화합물에 의해 KCB 화합물의 다양성과 약물성이 확대되고 있다.

### 3) 선별 구매에 의한 화합물 라이브러리 확장

국내 자원만으로 충족하기 힘든 화합물 다양성을 신속하게 확보하기 위하여 의약 및 분자설계 전문가의 화학정보학, 분자모델링 기술을 활용하여 약물성 및 다양성 극대화를 고려한 골격 구조의 화합물을 외국 vendor로부터 선별하여 구매, 확보하고 있다. 새로운 chemotype의 화합물은 chemical space 확장에 필수적이며, 특히 새롭게 임상단계에 진입하였거나 승인된 화합물의 구조 중 독창성이 높거나 보유 종수가 많지 않은 골격구조를 확인하여 우선적으로 신속하게 확보하고 있다.

일례로 microtubule에 작용하여 항암제로 연구 중이던 sabizabulin은 SARS-CoV2 경구용 치료제로 긴급 승인을 앞두고 있다. sabizabulin 구조 중 indole 3번 위치에 imidazole이 치환된 골격구조(A)의 화합물 종수가 많지 않고, 동시에 imidazole의 4번에 carbonyl 치환기가 있는 골격 구조(B)의 화합물 수는 매우 적다. imidazole의 4번에 benzoyl 치환기가 있는 골격구조(C) 화합물 수도 많지 않다. 약으로 개발되고 있는 물질들의 골격 구조 분석을 통해 신속하게 chemical space를 확대할 수 있다.



다양성 화합물은 신약소재화합물을 대량보유하고 관리 시스템을 갖춘 vendor의 DB를 확보하여 진행한다. Lipinski Rule of 5, Veber rule 등 알려진 약물성에 부적합한 물질들, 의약화학적으로 부적절한 작용기(functional group) 구조를 갖는 물질들, 다수의 약효시험에서 비선택적으로 false positive 효과를 보이는 PAINS (Pan-assay Interference compounds) 물질들은 1차적으로 제외한다. 1차에서 선별된 화합물의 골격구조를 다양한 방법으로 clustering 하고, KCB 보유 물질들과 구조적 유사도를 비교, 분석하여 다양성을 최대화하도록 구매화합물을 선별한다. 임상 단계 및 승인 화합물과 단일 성분의 천연물도 구매를 통해 확보하여 약물 재창출 연구 등을 지원하고 있다. Kinase, GPCR 등 타겟 클래스별 목적형 화합물들을 구성하거나 확대하기 위해, 해외구매처에서 미리 분류하여 구성해둔 라이브러리로부터 선별 구매하기도 한다. KCB가 제공하는 목적형 라이브러리 중 GPCR 라이브러리와 PPI 라이브러리는 해외 구매처에서 제공하는 라이브러리로부터 선별 구매하여 구성하였다. PROTAC, Molecular glue 등의 라이브러리 구성을 위해 해외구매처 화합물의 구매를 고려하고 있다.

## 화합물 품질 관리

### 1. 입고 시 품질 관리

#### 1) 연구성과 기탁 및 위탁합성 화합물

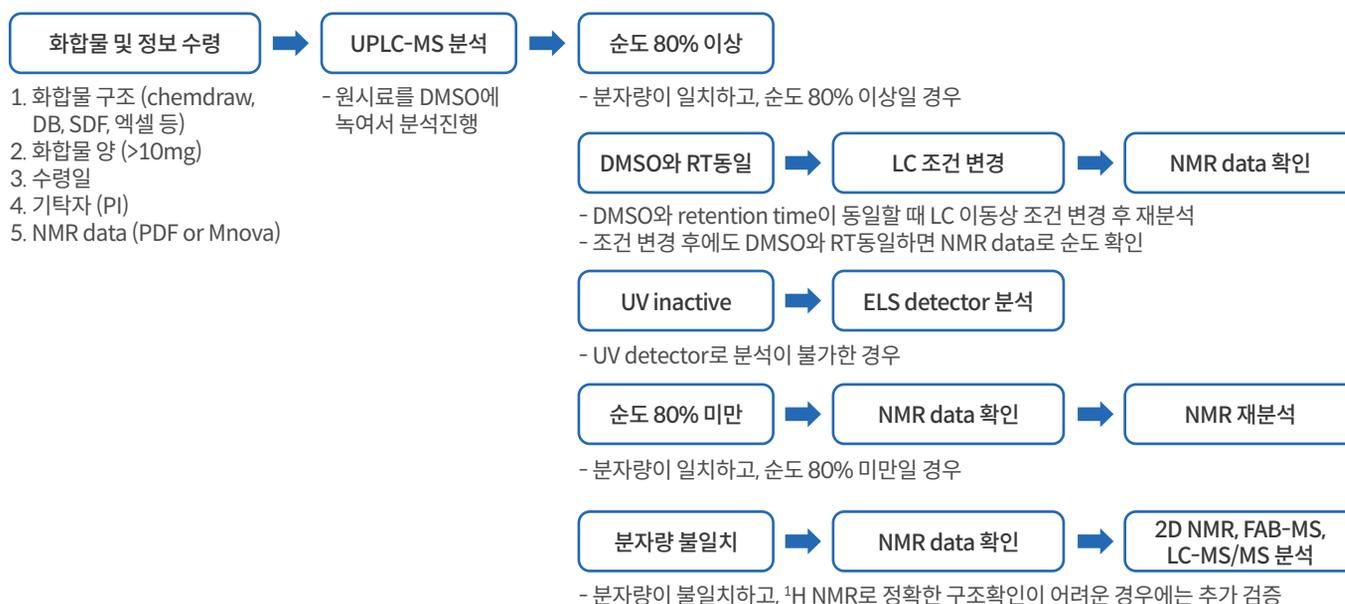
## 구조 적합성 및 중복성 검토

기탁 화합물의 실물을 수령하기 전에, 화합물 구조를 우선적으로 확인하여 적합성 및 중복성을 검토한다.

- 적합성 검토 : 무기물, 금속 화합물, 상온에서 불안정한 화합물, 물 또는 빛에 민감한 화합물, DMSO와 반응 가능성이 있는 물질들은 기탁 화합물에서 제외한다. 산소-실리콘, 질소-실리콘 등의 불안정한 결합구조를 포함하는 화합물, benzyl halide,  $\alpha$ -keto alkyl halide 등 물이나 DMSO와 반응 가능성이 있는 물질들을 제외한다.
- 중복성 검토 : KCB에서 기보유하고 있는 물질의 경우는 배치를 달리하여 보관한다.
- 적합성 및 중복성 검토 후, 화합물 실물과 관련 분석자료를 수령한다.

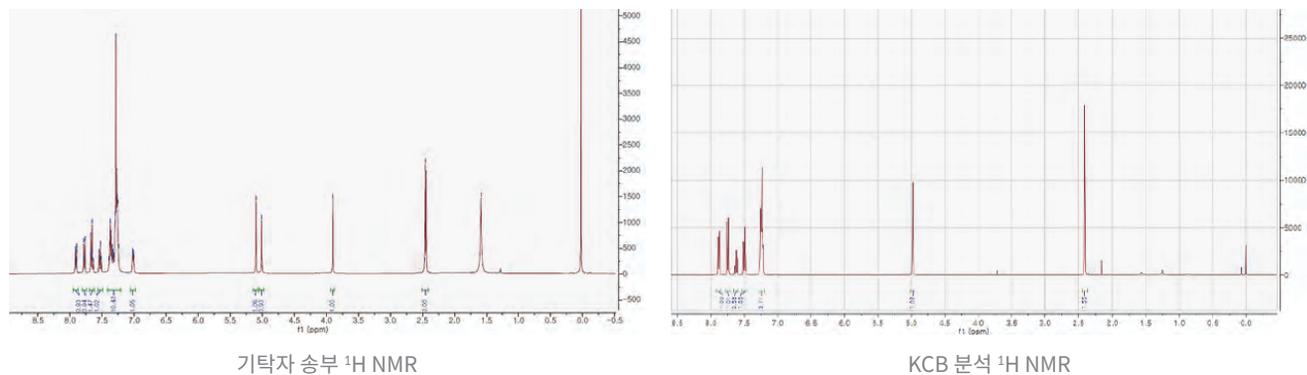
## 구조 검증 및 순도 분석

기탁자로부터 화합물이 수령되면 먼저 화합물의 정보들을 확인한다. 화합물의 총 개수와 코드 번호가 기탁자가 보내준 정보와 수령한 화합물이 일치하는지 확인하고, UPLC-MS 분석으로 분자량과 순도를 측정한다



- 1차 UPLC-MS 분석으로 구조와 분자량의 일치 여부 및 순도가 80% 이상인지를 확인한다. 순도 80% 이상이고 분자량이 일치하면 기탁자가 보내준  $^1\text{H}$  NMR 자료를 확인한 뒤 최종 수령을 확정한다.
- UV 흡광을 나타내지 않거나 약한 UV inactive 화합물은 UV detector 대신 Evaporative Light Scattering Detector (ELSD)로 측정한다. DMSO와 retention time (RT)가 동일한 화합물은 이동상 조건을 변경하여 재확인한다.
- 구조 파일의 오류 확인 및 수정 : 기탁자가 송부한 2D 구조와 달리  $^1\text{H}$  NMR sheet의 구조가 KCB에서 UPLC-MS로 분석한 분자량의 화학구조와 일치하는 경우에는 기탁자에게 문의하여 구조를 확인하고 파일의 구조를 수정한다(구조 파일에 오류가 있거나 바이알이 바뀐 경우가 있음).

- 순도가 80% 미만이거나 분자량 불일치 화합물의 경우 UPLC-MS 분석을 한 번 더 진행하고, 1차 분석결과와 동일하게 나오면 기탁자가 보내준  $^1\text{H}$  NMR을 확인하고, 경우에 따라 KCB에서  $^1\text{H}$  NMR을 재분석한다.



[기탁자가 보내준  $^1\text{H}$  NMR과 KCB에서 분석한  $^1\text{H}$  NMR 비교]

- 기탁자가 보내준  $^1\text{H}$  NMR 정보는 구조와 일치하고 불순물이 확인되지 않지만, KCB에서 수령한 화합물의  $^1\text{H}$  NMR은 이와 다르게 구조가 다르거나 불순물이 포함된 경우가 있다. KCB에서 분석한  $^1\text{H}$  NMR 데이터를 기반으로 기탁자에게 추가적인 정제 등을 요청한다.
  - 순도는 80% 이상지만 분자량이 다른 경우, KCB가 자체 분석한  $^1\text{H}$  NMR 및 UPLC-MS 데이터로 해당 분자량의 구조가 유추되는 경우에는 기탁자에게 유추되는 구조에 대한 확인을 요청한다.
- $^1\text{H}$  NMR 데이터와 KCB가 보유하고 있는 UPLC-MS의 ESI MS로 분자량 확인 및 순도 분석이 어려운 경우에는 2D NMR (NOESY, COSY, HSQC, HMBC 등), FAB MS, LC-MS/MS 등 다양한 분석 장비와 조건을 활용하여 분석을 진행한다.

## 2) 구매 화합물

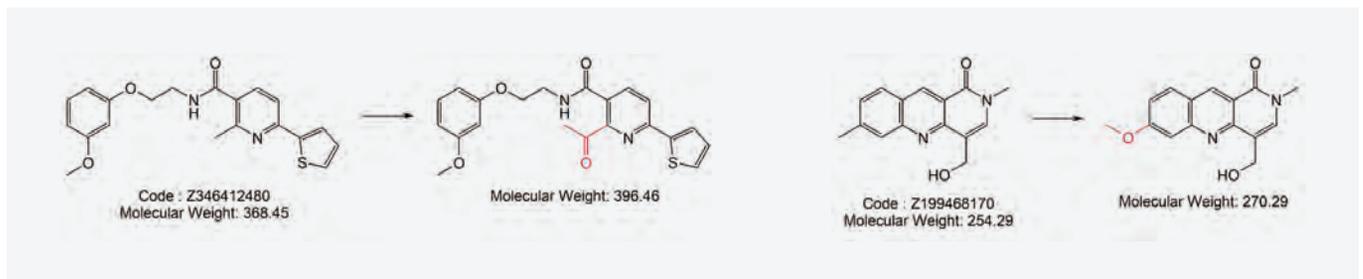
구매화합물은 해외 대형 vendor가 자체적으로 품질관리를 수행하고 있으므로, 구매하는 모든 화합물에 대해서 품질검사를 수행하지는 않는다. Active 및 Hit 화합물의 품질검증 단계에서 일부 구매화합물의 구조 오류가 확인되어 2017~2021년 구매화합물의 약 2~3% 일부를 무작위 선별하여 품질 검증을 진행하였다.

- DMSO 용액으로 제작된 마스터 튜브 3,722종의 품질 분석 결과, 순도가 80% 미만이거나 분자량이 일치하지 않는 화합물이 74종 (1.99%) 확인되었다. DMSO 용액에서 화합물이 불안정하여 변질되는 경우가 있으며, 74종에 대한 Powder(원시료)분석 결과 58종의 (1.56%) 품질 미달이 확인되었다. 16 종(0.43%)의 화합물은 DMSO 용액에서 불안정한 것으로 추정된다.
- 구매화합물에 대해 무작위 선별 품질 검증한 결과, 평균 2% 정도의 불량률이 나타났다. DMSO 용액에서 불안정한 화합물도 존재하여, 현재 품질검증 시스템으로 100% 고품질 화합물만을 관리하는 것이 어렵다는 것을 확인하였다. 화합물을 분양받아 실험한 활용자들은 Hit 도출 후 **추가적인 연구나 논문 등의 연구 결과 공개에 앞서서 KCB에게 품질 분석을 요청**하여 실험 시점의 화합물 품질을 확인함으로써 잘못된 시료를 사용하여 발생하는 데이터의 오류를 최소화해야 할 것이다.

구매 년도	구매 회사	구매 총수	분석 총수	순도미달 (DMSO 용액)			순도미달 (Powder)		
				80% 미만	M.W 불일치	계(불량률)	80% 미만	M.W 불일치	계(불량률)
2021	A사	24,240	607	8	2	8 (1.3%)	4	2	6 (0.99%)
2020	A사	16,196	406	5	5	10 (2.5%)	4	2	6 (1.5%)
	B사	7,793	195	3	3	6 (3.1%)	3	3	6 (3.1%)
2019	A사	32,461	890	13	2	15 (1.7%)	11	1	12 (1.3%)
2018	A사	31,546	788	7	4	11 (1.4%)	7	2	9 (1.14%)
	B사	14,912	346	7	1	8 (2.3%)	6	1	7 (2.0%)
2017	A사	10,224	256	11	2	13 (5.1%)	8	2	10 (3.9%)
	C사	9,991	234	3		3 (1.3%)	2		2 (0.85%)
계		147,363	3,722	55	19	74 (1.99%)	45	13	58 (1.56%)

[무작위 선별 구매화합물 품질 분석 결과]

- 순도는 높지만 분자량이 파일의 구조와 일치하지 않은 화합물의 구조는  $^1\text{H}$  NMR과 LC-MS/MS 분석을 통해 규명하고, 구매처의 최종 확인 후 수정하는 작업을 진행하였다.

[A사 구매화합물 (2018년) → LC-MS/MS와  $^1\text{H}$  NMR 분석을 통해 구조 규명 및 수정]

### 3) Tube Audit 측정(침전 확인)

- 화합물 ID를 부여하고, 칭량 및 2D master tube에 DMSO 용액 제작 후 Tube Audit를 측정하여 강침전인 화합물은 분양 시 별도 관리한다.

## 2. Hit 또는 Active 화합물 품질 검증

- KCB는 2014년부터 품질검증을 위한 분석 장비 시스템을 구축하였다. 2014년 이전에 기탁된 화합물들은 최신년도부터 역순으로 순차적 순도 분석을 진행하고 있으며 현재 2006년 이후 기탁된 화합물에 대해서는 분석이 완료되었다. 2000년~2005년 사이에 기탁된 화합물은 분석자료가 없고, DMSO 용액에서 변질될 가능성이 있다. KCB는 Active 또는 Hit 물질이 확인되면 추가 연구에 앞서서 품질 분석 서비스를 제공하고 있다.

- Active 화합물에 대해서는 기존 분석자료가 있을 경우, 분석일과 순도 정보를 제공하며 기존의 분석자료가 없을 경우에는 요청한 시점에 분석을 진행하여 정보를 제공한다. Active 화합물의 경우에도 분석일이 오래 경과되었거나 중요도에 따라 사용자가 요청하면 재분석을 한다.

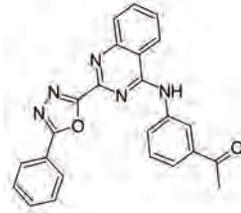
귀 기관에서 수행하신 약효시험으로 분석을 요청한 화합물 2종에 대한 LC-MS 분석 결과입니다.

No	ID	Position	Purity(%)		분석일
1	00**-21-89****	CPK-M1-01****-B04	DMSO 용액	100	2022-04-25
2	00**-21-78****	CPK-M1-01****-H04	DMSO 용액	100	2022-04-25

[Active 분석 보고서]

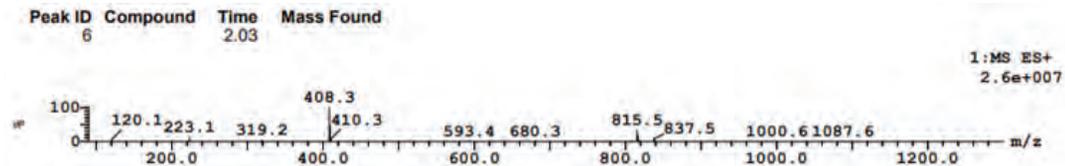
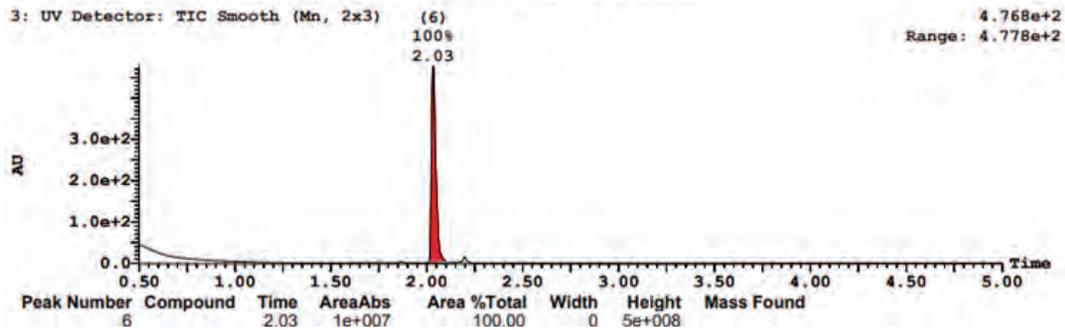
- Hit 화합물은 분석 정보가 있더라도, 요청 시점에 재분석하여 분석 스펙트럼과 함께 분석 정보를 제공한다.

LC-MS Data-1	
ID : 00**-21-79****	MW= 407.44



### LC-MS

Sample 12 Vial 1:B,4 ID 12 File LSYA175-12 Date 06-Nov-2020 Time 11:34:42 Description



[Hit 분석 보고서]

## 화합물 등록 및 마스터 튜브 제작

### 1. KCB ID 부여

- 품질 검증이 완료된 화합물은 KCB의 ID가 부여되고 칭량 리스트를 작성한다. 칭량 리스트에는 화합물 KCB ID, 분자량, 보유량 등이 기재된다.

### 2. 마스터 튜브(DMSO 용액) 제작 및 DB 등록

- 5 mM DMSO 용액 0.8 mL를 제작하기 위한 화합물의 양을 엑셀 파일에 작성한다. 화합물은 2D 마스터 튜브에 칭량하며, 칭량 저울은 엑셀파일과 연결되어 칭량 무게는 엑셀 파일에 바로 기재된다. 칭량된 양을 기준으로 0.8 mL DMSO 용액의 정확한 농도를 계산한다.
- DMSO 용액 제작 후, 마스터 튜브를 무작위로 선별, 질량 분석을 실시하여 칭량 과정에서의 오류 여부를 확인한다. 확인 후 마스터 튜브의 2D 바코드를 스캔하고 KCB ID와 마스터 튜브 바코드를 연계하여 DB에 등록한 후 Tube Audit을 측정하여 침전 여부를 확인한다. 마스터 튜브는  $-20^{\circ}\text{C}$  AutoStorage에 보관한다.
- 원시료는 냉장창고( $-5^{\circ}\text{C}$ )에 입고하며 원시료 바이알의 Rack 및 Position을 지정하고, 바이알 및 Rack에 바코드를 부착한 후, 바코드 정보를 DB에 입력한다.
- 화합물의 KCB DB 등록이 완료된 후, 기탁필증이 기탁자에게 발급되고 NTIS에 과제정보를 포함하여 등록한다.



기고문

# 인공지능 신약개발 활성화를 위한 한국제약바이오협회 인공지능신약개발지원센터의 역할

한국제약바이오협회 인공지능신약개발지원센터 센터장  
한국과학기술원(KAIST) 화학과 교수

김우연

## 1. 인공지능 신약개발 활성화와 인공지능신약개발지원센터(KAICD)

### 1) 인공지능(AI) 신약개발

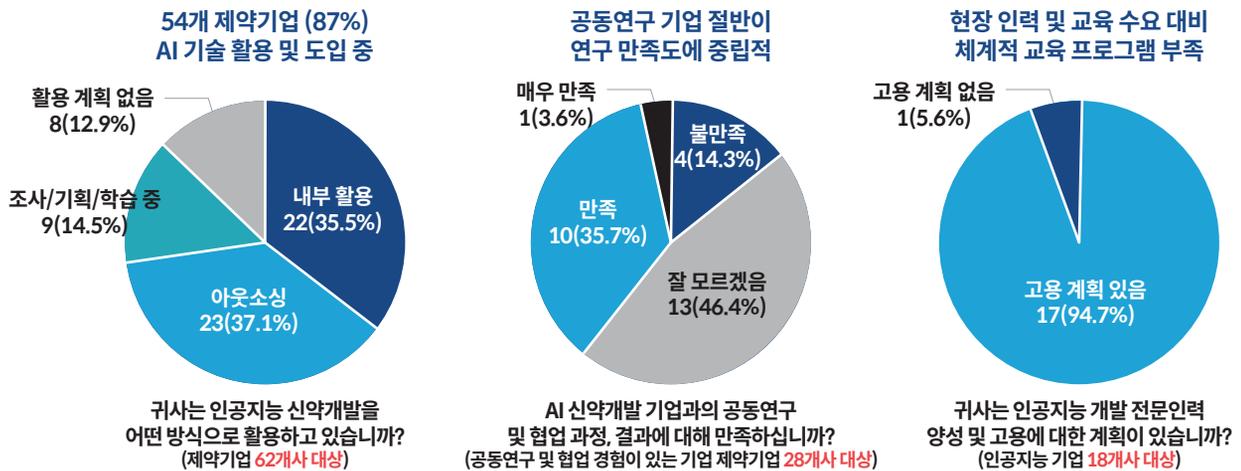
인공지능(AI)은 사람의 학습, 추론, 지각 능력을 인공적으로 구현하여 사람의 지능을 컴퓨터가 모방할 수 있도록 만들어주는 기술이다. 인공지능은 수십 년에 걸친 알고리즘 개선과 다양한 분야에서 수집된 빅데이터를 바탕으로 눈부신 발전을 거듭하고 있다. 인공지능은 정보화 사회에서 지능화 사회로 넘어가는 핵심 기술로 부각되며 교육, 실생활, 산업 등 모든 분야를 막론하고 사회적으로 큰 화두가 되고 있다.

신약 연구개발 분야에서도 인공지능은 이미 친숙한 주제로, 관련 기술을 활용한 사례가 증가하는 추세다. 신약개발은 크게 질병에 대한 타겟 단백질 발굴, 히트 및 선도물질 발굴, 합성 가능성 및 효능, 독성 등에 대한 평가를 진행하여 최적의 후보물질을 발굴하는 과정과 전임상과 임상의 단계를 거쳐 실제 약물로 개발되는 과정으로 나눌 수 있다.

인공지능은 후보물질 발굴부터 임상까지 모든 단계에 다양하게 적용 가능하며, 단계마다 특화된 기술을 적용할 수 있다. 인공지능 기술은 신약개발 프로세스에 소요되는 막대한 비용과 시간을 획기적으로 절감해 줄 수 있는 차세대 기술로 주목받으며 신약개발 분야의 글로벌 트렌드로 자리매김했다.

## 2) 국내 인공지능 신약개발의 현주소

제약·바이오 선진국들은 인공지능 신약개발의 효용성을 인지하고, 본격적으로 활용하기 위해 다양한 민·관 협력 프로젝트를 추진하고 있으며, 글로벌 제약·바이오 기업 역시 신약개발 연구에 최신 인공지능 기술을 적극적으로 활용하고 있다. 국내에서도 신약개발 과정에 인공지능을 활용해야 한다는 필요성이 대두되어 활발한 움직임을 보이고 있지만, 아직은 도입단계이며 본격적인 활용단계로는 나아가지 못하고 있다. 국내·외 인공지능 전문기업과 제약기업 간의 파트너십을 통한 다수의 공동연구 사례가 진행되고 있지만, 협력 초기 단계다 보니 아직은 괄목할 만한 성공사례를 도출하지 못하고 있다.



출처: 2022년도 인공지능신약개발지원센터 자체 설문조사

[인공지능 신약개발 교육의 필요성]

국내 인공지능 신약개발 산업이 본격적 활용단계로 발전하지 못하는 가장 큰 원인은 신약개발과 AI를 동시에 이해하고 접목할 융합형 전문인력 부재에 있다고 진단한다. 인공지능신약개발지원센터에서 실시한 22년도 제약·바이오 기업 대상 설문조사에 따르면, 기존 신약개발 전문가는 인공지능을 활용하기 어려워하고, 인공지능 전문가는 신약개발에 대한 이해가 부족하다는 의견이 다수 존재하였으며, 이를 극복하기 위한 체계적인 전문인력양성 시스템도 미비한 것으로 파악되었다.

### > AI-제약 기업 간의 협업 시스템 필요

- “서로 추구하는 이해관계가 달라 협업이 쉽지 않음”
- “기술력 있는 회사와의 연구 협력 연계 시스템이 구축되었으면 함”
- “협회 측에서 기업 간 주기적인 파트너링 장이 마련되면 좋을 것 같음”
- “아직 이렇다할 성과를 내지 못하는 것 같음. 제약회사와 AI업체 간의 간극이 너무 큼”

공동연구 및 협업 시 불만족스러운 이유와 이를 해결하기 위한 방안은?  
출처: 2022년도 인공지능신약개발지원센터 자체 설문조사

### AI 신약개발, 양질 데이터 확보 관건...협업 시스템 절실

이복용 기자 2023-08-06 06:20 **DAEILLAB**

- [미래포럼]글로벌 빅파마, 인공지능 R&D 투자 증가
- 신약 후보물질 발굴 시간과 비용 절약...도전하고 경험 쌓아야

특집 | AI 신약 개발이 미래다... **주간동아**  
우리나라에서 AI 신약 개발 성공하려면?  
데이터 확보, AI 기술 인재 확보, 정부 지원 등 필요

도 인공지능 신약 개발은 제약회사 단독으로 해결할 수 있는 문제가 아니라, 개발을 전문으로 하는 연구자와 더불어 인공지능 기술을 연구하는 개발자의 협업도 필수적이다. 현재 우리

MEDICAL Observer

### [신년기획] 국내사도 AI 신약개발에 '속도'...한계는 여전히

국내사도 AI 활용 신약개발 협동 시장 확장은 여전히 한계...정부 적극 나서야

미국 업체에서는 AI를 활용한 신약개발 사례가 커져서만 **정부와 기업들이 협력할 수 있는 생태계를 조성**해야 한다고 주장한다.

[인공지능 신약개발 협업의 필요성]

인공지능 전문기업과 제약기업 간의 소통 창구 부재도 산업 발전의 큰 걸림돌로 꼽힌다. 인공지능 전문기업은 제약기업이 요구하는 구체적 기술을 파악하기 어려워하고, 제약기업은 인공지능 전문기업이 확보한 기술의 실체와 모델의 성능을 확인하기 어려워하고 있다. 이에 따라 기업 간 매칭이 적극적으로 이루어지지 않아 공동연구 등 협업이 제대로 추진되지 않고 있다.

소통 창구의 부재는 인공지능 신약개발에 필수적인 조건으로 데이터를 제대로 활용하지 못하고 있는 원인으로도 지목된다. 인공지능 신약개발에는 다양한 조건으로 데이터가 필요하나 기업, 대학, 연구소, 병원, 정부는 각각 자체 데이터의 수집 관리에 집중하고 있으며, 공유를 통해 부가가치를 창출하는 단계로 나아가지 못하고 있다.

### 3) 인공지능신약개발지원센터(KAICD)의 역할과 기능



[인공지능신약개발지원센터(KAICD)의 역할 및 목표표]

한국제약바이오협회 인공지능신약개발지원센터(이하 KAICD)는 제약바이오산업의 인공지능 신약개발 가속화 및 디지털 전환 주도를 통한 경쟁력 제고를 목적으로 2019년 3월 개소했다. KAICD는 산·학·연 연계 지원을 통한 인공지능 신약개발 오픈 이노베이션(Linker), 전문인력 양성을 통한 인공지능 신약개발 생태계 강화(Education), 기술 및 인프라 서비스 제공을 통한 성공사례 도출(Accelerator), 제약·바이오 산업의 디지털 전환 지원(Digital transform)을 사업 방향(LEAD, Linker & Education & Accelerator & Digital transform)으로 설정하고 제약·바이오 산업의 신약개발 패러다임 전환에 주력하고 있다.

KAICD는 산업계 전문가를 대상으로 매년 실시하는 설문조사와 시장분석을 바탕으로 다음의 사업을 기획 수행해나가고 있다. 첫째, 보건복지부 정책과제인 ‘인공지능 신약개발 교육 홍보사업’ 수행기관으로서 인공지능 신약개발 현장형 전문가 양성사업을 펼치고 있다. 둘째, 산학연병정 협력사업으로 국립암센터와 함께 바이오뱅크 사업, 과학기술정보통신부 기획과제인 ‘인공지능 신약 데이터 활성화 방안 마련 연구’를 진행하고 있다. 셋째, 인공지능 신약개발을 가속화 하기 위해 제약바이오기업 연구자들이 손쉽게 사용할 수 있는 인공지능 신약개발 모델(ONE 플랫폼)을 구축하고 있으며, 오는 9월부터 서비스를 개시할 계획이다. 또한 올 하반기부터 인공지능 전문기업과 제약바이오기업의 오픈이노베이션(피칭 및 파트너링) 행사를 수시 개최할 계획이다.

성함	소속	부서	직위
김동섭	한국과학기술원	바이오뇌공학과	교수
김선	서울대학교	컴퓨터공학과	교수
김정렬	삼성서울병원	임상약리학과	교수
김화중	강원대학교	컴퓨터공학과	교수
박준석	(주)대웅제약	신약센터	센터장
신현진	녹십자	(재)목암생명과학연구소	부소장
오지선	서울아산병원	영상의학과	교수
이선경	한구화학연구원	의약정보플랫폼센터	센터장
이지영	대구경북첨단의료산업진흥재단	구조설계부	부장
장동진	가톨릭대학교	안과학	교수
최인희	한국파스퇴르연구소	의약화학부	팀장
추연성	바이오에스파트너스	대표	대표
한남식	케임브리지대학교	밀너연구소	교수
황대희	서울대학교	생명과학	교수

[AI신약개발자문단 리스트]

성함	소속	직위
허승룡	굿인텔리전스	연구소장
최민수	넷타겟	대표
손우성	노보렉스	대표
이지현	닥터노아바이오텍	대표이사
박성수	디어젠	부대표
배영우	메디리타	대표
유호진	바이온사이트	대표
정경중	볼츠만바이오	대표
송상욱	스탠다임	CSO
조혜경	신테카바이오	경영총괄 사장
이선호	아이겐드릭	대표
박혜진	에이조스바이오	상무
허남구	에임드바이오	연구소장
김이랑	온코크로스	대표
조은성	인세리브로	대표
황현준	제이엘케이바이오	대표
김완규	카이팜	대표
채종철	파로스아이바이오	전무이사
박재형	팜캐드	전무이사
안광성	피디젠	대표이사
최학배	하플사이언스	대표
이세한	히츠	이사

[AI신약개발협의회 리스트]

KAICD는 AI 신약개발 네트워크를 공고히 하기 위해 지난 5월 14명의 대학, 기관, 기업의 전문가들로 구성된 ‘AI신약개발자문단’을 발족했으며, 7월에는 22개 인공지능 신약개발 기업이 참여하는 ‘AI신약개발협의회’를 발족했다. 또 지난 5월에는 보건산업진흥원과 함께 바이오코리아 행사에서 ‘인공지능 신약개발 컨퍼런스’ 세션을 진행했으며, 오는 8월부터는 인공지능 신약개발 정보 허브로 성장할 KAICD 홈페이지를 구축해 국내외 인공지능 신약개발 동향은 물론, 인공지능 기술 소개와 협력연구 매칭, 구인구직 정보를 서비스할 계획이다.

## 2. 인공지능신약개발지원센터의 주요 추진 사업

### 1) 인공지능(AI) 활용 신약개발 교육 및 홍보 사업

#### I 사업목적



인공지능 활용 교육 및 홍보사업은 AI 신약개발 현장의 인력 수요에 부응하는 융합형 전문인력 양성에 있다. 세부적으로는 온라인 교육 플랫폼(LAIDD)을 구축하여 교육의 질과 편의성을 제고하고, 현장 중심의 교육을 실시하여 실무인재를 산업현장에 공급하는 것이다. 아울러 AI 기술과 신약개발 기술의 융합을 위한 소통 채널 및 네트워크를 구축하는 것이다.

#### I 진행현황

인공지능 신약개발은 다양한 분야의 전문가들 간 협업이 필요하나, 분야 간 전문성 차이로 인한 소통의 어려움이 존재하므로 연구자들의 수요에 맞는 다방면의 교육 커리큘럼이 필요하다. KAICD에서는 융합 교육 커리큘럼에 필요한 강의를 개설하고, 교육생 맞춤형 러닝트랙을 설계함으로써 인공지능 신약개발 분야 전문인력을 양성하고 있다.

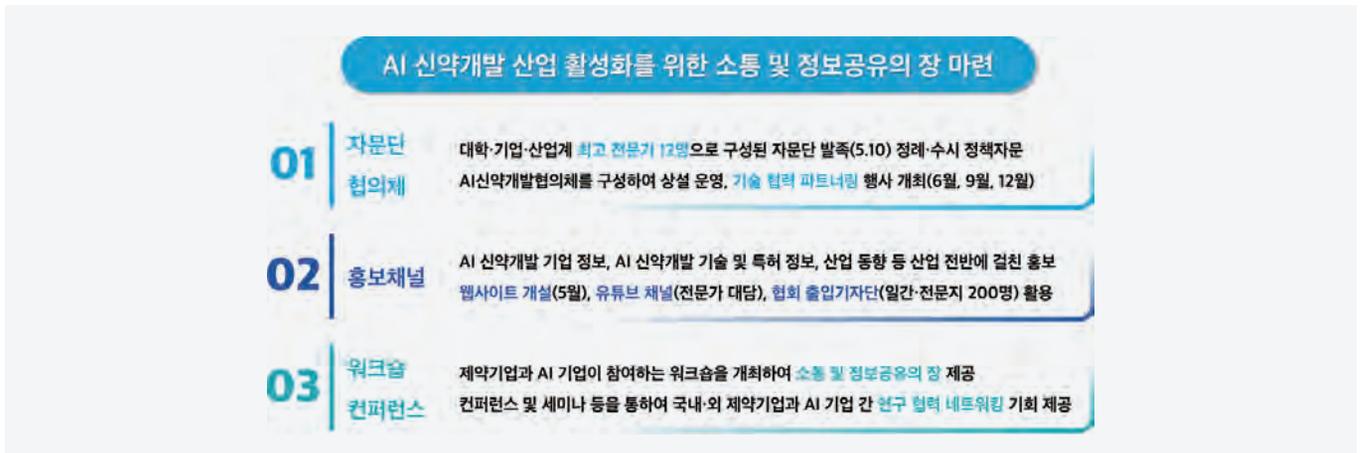
KAICD에서 설계한 LAIDD(Lectures on AI-driven Drug Discovery)는 인공지능 신약개발 교육을 위해 다양한 기반 지식이 포함된 강의를 모아놓고 수강자들이 필요한 강의만을 선별하여 학습할 수 있도록 한 온라인 교육 플랫폼이다. LAIDD는 클라우드 인프라를 기반으로 구축되었으며, 데이터의 경우, 운영 및 활용 주체에 따라 학습 콘텐츠 데이터와 운영 데이터로 구분하여 관리하고 있다.



[인공지능 신약개발 교육 추진전략]

오는 9월부터 본격 오픈할 온라인 교육플랫폼(LAIDD)은 총 350시간, 70여 개의 강좌가 탑재될 예정이다. 지난해 28개 강좌에서 올해 신약개발을 위한 딥러닝 프레임워크 활용 기초(AI), 분자생물학 기초(Bioinformatics), 분자동역학 시뮬레이션 방법(Cheminformatics) 등 45개의 신규 강좌를 마련했다. 또한, 교육생의 학습 목표 설정에 도움을 주기 위한 10개의 러닝트랙(5개 기초트랙 : 의약화학, 생물정보학, 화학정보학, 프로그래밍, 인공지능, 5개 직무트랙 : 단백질 기반 약물탐색, 리간드 기반 약물탐색, 단백질 구조예측, 약물재창출, 표적 발굴)을 제공한다.

PharmColab(Pharmaceutical Collaborate Laboratory)은 신약개발 연구에 인공지능 활용을 원하는 기업, 기관, 연구자, 교육생을 위한 현장 운영 중심의 종합 지원 프로그램이다. 현장 실습 교육, 기관별 협력 교육, 기술 지도 및 지원, 학회 및 대학의 단기 교육과정, 스터디 프로그램 등 AI 신약개발 연구생태계 활성화를 위한 다양한 교육프로그램을 지원한다.



[인공지능 신약개발 홍보 추진전략]

대학, 기업, 산업계 최고 전문가로 구성된 자문단 및 협의체에서 이루어지는 정례·수시 정책자문과 기술 협력 파트너링을 통해 소통과 정보공유의 장을 마련하고 있다. 해당 과정으로 축적되는 네트워크 및 데이터를 기반으로 인공지능 신약개발 로드맵을 제작하여 정부 관계자, 연구자나 학생들에게 인공지능 신약개발과 관련된 현주소 및 미래 전망을 제공함으로써 관련 산업이 장기적으로 발전할 수 있는 토대를 마련하고자 한다.

KAICD 웹사이트, 유튜브 채널, 협회 출입기자단을 통해서도 소통과 정보공유의 장을 마련하고 있다. 이를 기반으로 인공지능 신약개발과 관련된 기업, 기술, 특허 정보, 산업 동향 등 산업 전반에 걸친 홍보를 진행하고 있으며, 이러한 홍보채널은 신약개발에 활용되는 인공지능 분야 기술 발전과 성능개선의 성과를 파악하고, 협업 및 의사소통을 주도해 나갈 수 있는 환경을 조성해 줄 것으로 기대하고 있다.

KAICD는 인공지능 신약개발과 관련된 기관 간 의사소통을 유도하고, 산업이 나아가야 할 방향성을 제시하기 위해 BIO KOREA 2022, 산·병·정 워크숍 등 다양한 행사를 주최하고 있다. 추가로, 인공지능 신약개발 세미나를 통해 국내·외 인공지능 전문기업과 제약·바이오 기업 간의 지식 공유의 장을 마련함으로써 연구 협력 네트워킹 기회를 제공할 예정이다.

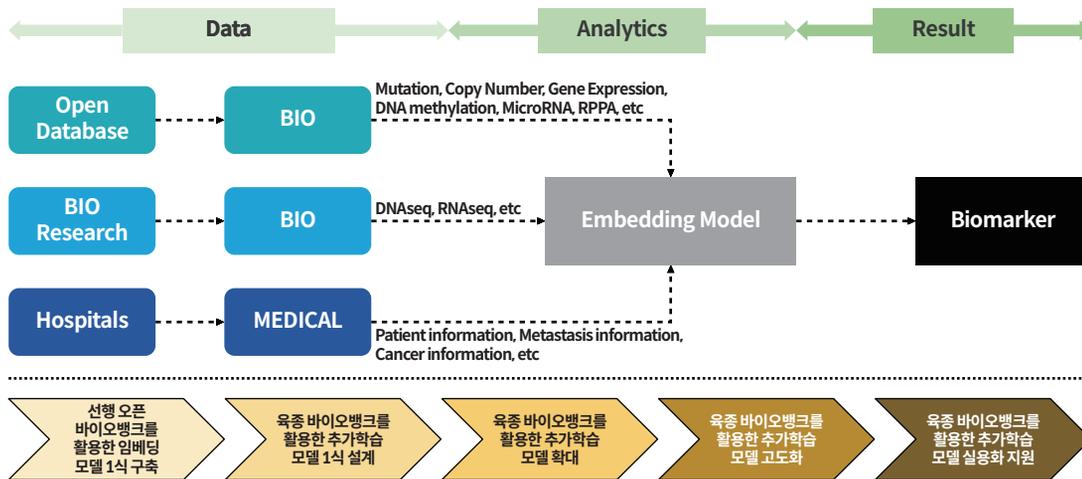
## 2) 육종암 분야 혁신형 바이오뱅크 컨소시엄 사업

### I 사업목적

본 컨소시엄 사업은 연구자원과 인프라가 부족한 희귀암에 대한 국가적 레지스트리를 구축하고 바이오뱅크를 통한 이행성연구를 진행함으로써, 희귀암 환자들의 생존률 향상에 기여하고자 수행되는 사업이다. KAICD는 해당 사업을 통해 수집되는 국내 육종 환자에 대한 바이오뱅크 데이터를 활용하여 바이오마커 발굴, 신규약물디자인 등을 도출하여 인공지능 신약개발 사례를 마련하는데 목적을 두고 있다. 또한, 사전학습 모델 공개를 통해 후속 연구 개발을 촉진하고자 한다.

### I 추진전략

본 컨소시엄 사업 내 KAICD의 최종 목표는 육종 바이오뱅크를 활용한 한국인 희귀암종환자의 프로파일 임베딩 모델 공개 및 실용화 지원이다. KAICD는 오픈 바이오뱅크 데이터 및 향후 구축될 육종 데이터를 활용하여 제약 산업 분야에서 해당 데이터가 활용될 수 있는 사례를 보여주고자 한다. 환자의 바이오 및 임상 데이터를 종합하여 분석할 수 있는 인공지능 모델을 개발하면, 병에 대한 진단을 하거나 약물 반응 등을 평가할 수 있는 바이오마커(Biomarker) 도출이 가능해지며, 이를 통해 정밀의료가 실현될 수 있다.



[육종암 분야 혁신형 바이오뱅크 컨소시엄 사업 추진 전략]

KAICD는 만 건 이상의 선행 오픈 바이오뱅크 데이터 샘플을 기반으로 한 유전자 발현 프로파일의 사전학습 임베딩 모델 1식을 기구축했다. 현재는 육종 바이오뱅크에 축적된 데이터를 활용하여 한국인 희귀암종환자 맞춤형 전이학습 모델 1식을 설계 중에 있으며, 추후 멀티오믹스 데이터를 활용한 강화학습 기반 바이오마커 발굴 임베딩 모델 설계를 통해 실용화 지원에 활용할 예정이다. 최종적으로 육종 바이오뱅크 데이터를 후속 연구 개발에 용이한 은닉 값으로 변형하는 모델을 공개할 것이며, 이를 통해 바이오마커 발굴모델, 약물 추천모델 등의 인공지능을 적용한 신약개발 사례 연구를 촉진할 계획이다.

### 3) 국내 AI 신약 데이터 공유 활성화 방안 마련을 위한 연구(FDDP)

#### I 사업목적

전문가 위원회 구성을 통한 데이터 공유 활성화 방안을 마련하고, 국내·외 데이터 공유 사례 및 현황 분석을 통해 시사점을 도출함으로써 국내 신약개발 데이터 공유 활성화 방안 수립을 지원하며, 최종적으로 인공지능 활용 신약개발 생태계 강화를 위한 연합형 신약 데이터 파트너십(FDDP : Federated Drug Data Partnership) 상세 추진 전략 및 추진 내용을 도출하고자 한다.

#### I 진행현황

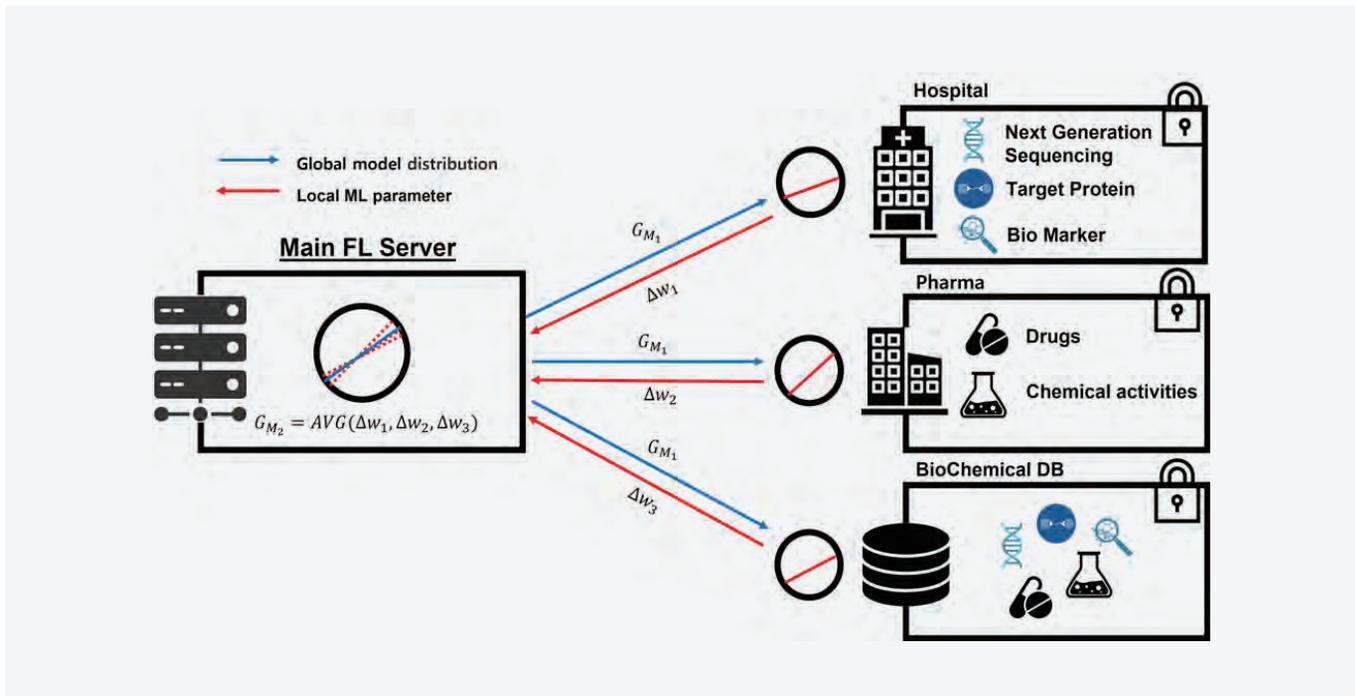


[FDDP 추진 전략]

국내 신약개발 데이터 공유 활성화방안 수립을 위해 사례 및 현황 분석과 전문가 위원회를 통하여 기존 정부 과제의 한계를 도출해내고 국내 제약·바이오 산업 현황에 맞는 데이터 공유 방안을 제안하고, 국내·외 법률에서 정의한 정보보호 기술 분석을 통해 데이터 공유와 관련한 데이터 법률의 특징점을 정리하고자 한다.

이를 기반으로 2019년도부터 수행 중인 인공지능 신약개발 플랫폼(KAIDD) 사업에 적용하고 활용할 방안을 제안할 계획이다. KAIDD은 여러 가지 인공지능 기반 신약개발 소프트웨어를 제공하고 있는데, 해당 소프트웨어들과 결합할 수 있는 데이터 공유 활용 방법을 구상하기 위해 해당 사업 수행기관과 협업하여 활용 방안을 도출할 계획이다.

현황 분석, 기술 분석, 전문가 위원회, 진행 중인 사업과 연계를 수행하면 국내 인공지능 신약개발 데이터 공유 활성화를 위한 시사점을 도출할 수 있다. 해당 과정을 통해 연합학습, 연합검증을 활용한 신약개발을 위한 인공지능 학습 목적 데이터 공유 활성화 방안을 제시하고자 한다.



[연합학습 기반 인공지능 신약개발 데이터 공유 방법 예시]

인공지능 모델을 개발하기 위해서는 궁극적으로 연합학습 형태의 공공 민간 파트너십이 필요하지만, 아직 민감 데이터를 다루야 하는 신약개발 분야에서는 연합학습의 기술적 신뢰도가 높지 않다. 연합검증 기술은 데이터의 공유에서 발생하는 리스크, 비용, 불확실한 인센티브 문제를 해결하기 위해 데이터 제공자 측면에 강점을 두는 연합형 프레임워크다. 데이터 제공자(병원)가 보유한 데이터를 공개하지 않고 모델만 공유하는 방식으로, 데이터 제공자는 보유 데이터로 전달받은 모델로 예측 결과만 생성해 모델 성능을 검증하는 과정을 수행하는 제한적인 데이터 제공자 중심으로 FDDP를 설계하고자 한다.

향후 FDDP 사업의 성공적인 정착을 위해 FDDP는 제약·바이오의 다양한 영역(후보물질 탐색, 질병 진단, 치료, 약효성 검증, 임상시험 등) 중 대표적인 응용 분야를 선정할 시범 사업을 기획할 예정이다. 시범사업 수행을 위해 응용 분야 후보를 도출하고, FDDP의 참여 기관 구축 방안을 기획 연구하여 시범 사업 안을 제시하고자 한다.

## 4) 클라우드 기반 인공지능 신약개발 플랫폼 구축 사업

### I 사업목적

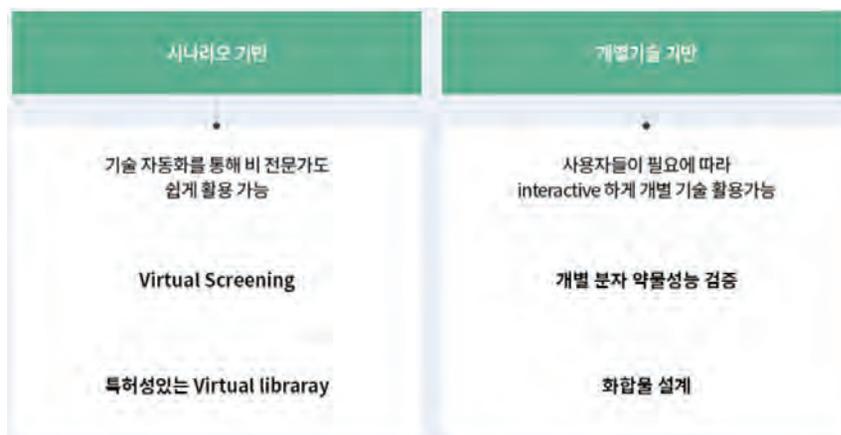
KAICD는 의약화학자와 같은 실험연구자들도 인공지능을 손쉽게 연구과제에 활용할 수 있도록 지원해주는 클라우드 기반 인공지능 신약개발 플랫폼 'ONE플랫폼'을 구축하고 있다. 한국제약바이오협회 회원사를 대상으로 인공지능 신약개발 플랫폼 서비스를 무료 제공하고자 추진되었으며, 현재 12개 기업, 29명의 신약개발 연구원이 베타테스트에 참여하고 있다.



[ONE플랫폼 사업 목적]

### I 추진전략

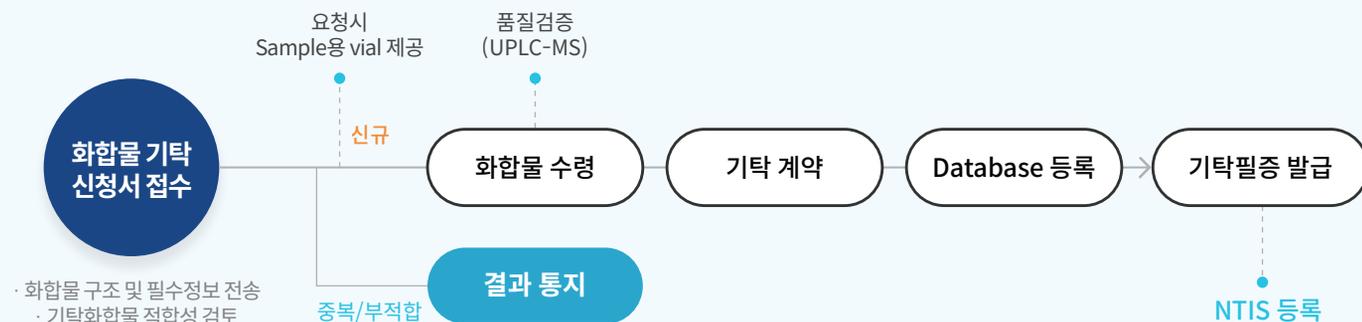
2022년 9월부터 한국제약바이오협회 회원사를 대상으로 베타테스트 결과를 반영한 오픈베타 서비스를 제공할 예정이다. 현재 ONE 플랫폼은 인공지능을 이용한 구조 기반 활성 예측과 관련된 기능(단백질 3차원 구조 기반 인공지능 활성 예측 및 이를 위한 전처리, 약물-단백질 3차원 결합구조 분석, 약물 분자 구조 설계 및 검증, 데이터 통합 관리 등)을 주로 제공하고 있으며, 추후 분자 설계, 물성 예측, 시뮬레이션 등의 최신 인공지능 기술들을 탑재하여 지속적으로 발전시켜나갈 계획이다.



[ONE플랫폼 기능 특징]

## 화학물 기탁 절차

문의 E-mail. chembank@kRICT.re.kr Tel. 042-860-7190 Web. www.chembank.org 통합데이터플랫폼. korea.chembank.org



### 기탁화학물 범위 및 기준

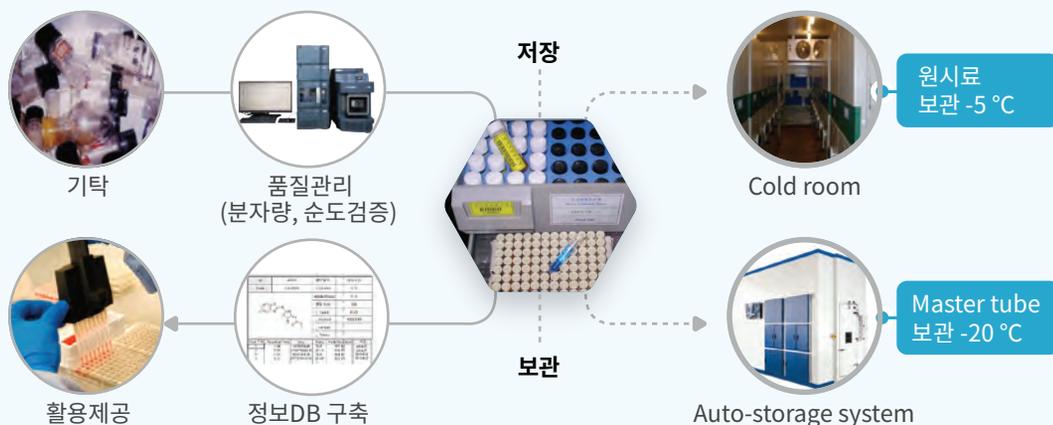
**I 범위** 유기합성 화합물 및 단일성분 천연물

**I 품질기준** 화합물 양 > 10 mg (권장), 순도 > 80% (한국화학물은행에서 UPLC-MS로 검증)  
<sup>1</sup>H-NMR 자료 제출

### 기탁자 혜택

- 기탁화학물에 대한 활용 결과 도출시 그 결과를 통보 받을 수 있다.
- 기탁화학물의 활용결과 Hit가 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.
  - 기탁화학물의 활용결과 수익이 발생할 경우: 기탁자의 기여도에 따라 수익의 일부를 분배 받을 수 있다.

### 화학물 보관 및 관리체계



## 데이터 활용 절차

문의 E-mail. chembank@kRICT.re.kr Tel. 042-860-7190 Web. www.chembank.org 통합데이터플랫폼. korea.chembank.org



### 정보제공 데이터 종류

분류	소분류
화합물 구조 정보	전체(분양 가능) 라이브러리
	구매화합물 라이브러리
	대표 라이브러리
	임상화합물 라이브러리
	천연물 라이브러리
	Focused 라이브러리
	Fragment 라이브러리
	Kinase 라이브러리
	PPI 라이브러리
	GPCR 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@kriect.re.kr Tel. 042-860-7190 Web. www.chembank.org 통합데이터플랫폼. korea.chembank.org



### 화합물 사용료 규정

- 화합물은 무상으로 제공합니다.
- 화합물 제공에 수반되는 실비용(plate, 분주기 tip, 튜브 cap 등)은 활용자가 부담합니다.
- 중소 / 벤처 / 대학교 / 연구원은 실비의 50%만 활용자가 부담합니다.

### 화합물 분양실비 부과

2022년 기준

\* 부가세 별도

Plate 종류	Plate 개수	단가	대기업 / 중견기업	중소 / 벤처 / 대학교 / 연구원
96-well (80종 / 1Plate)	1	23,400원	23,400원	11,700원
384-well (320종 / 1Plate)	1	89,400원	89,400원	44,700원

- 대표화합물(7,040종) 중소 / 벤처 / 대학교 / 연구원 기준 : 96-well (1,029,600원) / 384-well (983,400원)
- 화합물 분양 배송비용은 활용자가 부담합니다.



## 제공 화합물의 활용 결과(논문·특허 등)에 대한 권리관계 규정

### 규정목적

- 한국화학물은행은 기탁자들이 기탁한 화합물을 바탕으로 운영되고 있습니다.
- 기탁자들의 화합물 기탁을 장려하고, 동시에 화합물 사용자들의 불편함을 최소화하기 위하여 한국화학물은행이 제공한 화합물을 활용하여 도출된 연구결과(논문, 특허 등)의 권리관계는 아래와 같은 규정을 적용합니다.

### 규정내용

#### 활용결과(논문, 특허 등) 권리관계 규정 내용

1. 기탁자가 단순기탁 이외의 추가적인 기여가 없는 경우에는 화합물 기탁자를 논문의 사사(acknowledgement)에 기재하는 것이 "원칙"입니다.
2. 기탁자가 추가적인 기여(유도체 합성 제공, 관련 정보제공 등)가 있을 경우에는 기여정도에 따라 기탁자를 논문 공저자 및 특허 공동발명인(공동출원인)으로 "포함"을 장려합니다.
3. 기탁자가 "물질특허"가 있는 경우, 활용결과에 대한 "용도특허"는 사용자(발견자)가 취득할 수 있습니다.

\* 활용기관은 한국화학물은행의 라이브러리를 활용한 연구결과를 논문, 특허 등에 발표 또는 공개할 경우 "한국화학물은행 제공 화합물을 사용하여 연구가 진행되었다."는 사사 또는 문구를 기재하여야 합니다.

\* 한국화학물은행은 화합물 활용에 관한 지적재산권(intellectual property)에 관여하지 않습니다.

한국화학물은행 활용결과의 권리 규정은

과학계에서 통용되는 연구결과 기여도에 대한 "연구윤리 기본원칙"을 따르고 있습니다.



## 후속연구를 위한 화합물 추가합성 및 구매 진행 안내

1. 한국화학물은행은 소량의 화합물(10 mg)만 기탁 받아서 보유하고 있으며, 최대한 많은 연구자들의 활용을 위해 1차 스크리닝 및 Hit화합물의 검증에 필요한 최소량만 제공하고 있습니다. 진단단계(*in vivo* 실험 및 약물성/독성 시험 등) 실험에 필요한 충분한 양의 화합물은 서비스하고 있지 않습니다.
2. 진단단계의 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) 자체 연구진 또는 전문가를 활용한 합성 진행
3. 한국화학물은행(KCB) 활용 화합물 중에서 상용 화합물의 구매를 원하시는 경우, KCB에서 구매한 vendor 정보를 제공해 드립니다. 화학물질의 해외 구매 시 화평법 및 화관법에 대한 신고 및 등록 의무를 사전에 반드시 확인 바랍니다. (화학물질정보처리시스템, <https://kreachportal.me.go.kr>).

## 한국화학물은행 제공 라이브러리 종류

# 전체 Library

화합물 수 : 73만종

기본 제공량 : 5  $\mu$ L  
(DMSO 용액, 평균농도 5 mM)

## KCB Library

### 임상 Library

- 화합물 수 3,100
- 라이브러리 구성  
임상 I - III 상 단계 화합물 및 승인 약물(Clinically applied compounds)

### Fragment Library

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

### PPI Library

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

### 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

### 천연물 Library

- 화합물 수 1,600
- 라이브러리 구성  
단일성분 천연물 및 천연물 유사골격 (Natural product-like) 구조의 화합물

### Kinase Library

- 화합물 수 2,700
- 라이브러리 구성  
Kinase active site에 결합 가능성이 높은 화합물을 분자모델링 방법 (Docking)으로 선별하여 구성

### GPCR Library

- 화합물 수 8,600
- 라이브러리 구성  
해외 vendor로 부터 선별 구매화합물

## 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](http://www.chembank.org) / 통합데이터플랫폼 : [korea.chembank.org](http://korea.chembank.org)
- 주소 : 대전광역시 유성구 가정로 141 한국화학연구원 한국화합물은행 E2연구동 (우.34114)
- 전화 : 042-860-7190 / 팩스 : 042-860-7096 / E-mail : [chembank@kriict.re.kr](mailto:chembank@kriict.re.kr)

담당업무	이름	전화	E-mail
사업책임자	이선경	042-860-7148	<a href="mailto:leesk@kriict.re.kr">leesk@kriict.re.kr</a>
의약화학	이현규	042-860-7016	<a href="mailto:leehk@kriict.re.kr">leehk@kriict.re.kr</a>
화학정보학 / 분자모델링	이윤호	042-860-7453	<a href="mailto:yunolee1@kriict.re.kr">yunolee1@kriict.re.kr</a>
화학정보학 / 분자모델링	조남철	042-860-7093	<a href="mailto:nccho@kriict.re.kr">nccho@kriict.re.kr</a>
대외협력 / 정보관리	황순희	042-860-7190	<a href="mailto:chembank@kriict.re.kr">chembank@kriict.re.kr</a>
화합물관리	김선우	042-860-7171	<a href="mailto:swkim@kriict.re.kr">swkim@kriict.re.kr</a>
화합물관리	김선호	042-860-7090	<a href="mailto:shkim@kriict.re.kr">shkim@kriict.re.kr</a>
데이터베이스 / 화합물정보 관리	이유리	042-860-7092	<a href="mailto:yurilee@kriict.re.kr">yurilee@kriict.re.kr</a>
LC/MS 분석	이수연	042-860-7747	<a href="mailto:suyoun@kriict.re.kr">suyoun@kriict.re.kr</a>
LC/MS 분석	김수희	042-860-7070	<a href="mailto:rlatngml@kriict.re.kr">rlatngml@kriict.re.kr</a>

한국화학물은행은 국가연구개발사업의 화합물  
연구성과 관리·유통 전담 기관으로 지정되어 있습니다.  
[과학기술정보통신부 고시 제2022-41호]

