KCB

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 -

소개 및 연혁

한국화합물은행 소개

신약소재 화합물 및 데이터의 공동활용을 위한 핵심 플랫폼

- 화합물 및 활용 데이터 수집·관리·유통
- 산·학·연의 신약개발 및 바이오 연구 지원

한국화합물은행 설립목적

화합물 및 관련 정보를 수집·관리·분양하는 신약개발 및 바이오 연구의 핵심 인프라 구축
산·학·연 기탁기관과 활용기관간의 공동연구 중개

한국화합물은행 연혁

- **2000** 한국화합물은행 설립
- **2003** 화합물 관리 중심기관 지정 - 연구성과 기탁 등록제 도입
- **2004** 화합물 종합정보 관리시스템 구축
- **2008** 화합물 관리·유통 전담기관 지정(연구성과 전담기관 지정)
- **2010** 설립 10주년 기념 심포지엄 개최
- **2014** 화합물은행 확장 리모델링, 화합물 관리 자동화 장비 구축
  품질관리 장비(UPLC-MS : PDA detector) 구축
- **2015** 설립 15주년 기념 심포지엄 개최
- **2017** 화합물 관리 자동화 장비 – Master tube 96만개 저장 가능(-20 °C)
- **2018** 품질관리 장비(UPLC-MS : PDA, ELS detector) 추가 구축
- **2020** 설립 20주년 기념 심포지엄 개최
  통합데이터플랫폼(korea.chembank.org) 구축 및 운영
- **2021** 합성화합물클러스터 중앙은행 지정
- **2022** 생명연구자원 기탁등록 보존기관 지정
  화합물 73만종 확보

역할 및 임무

연구성과(화합물) 관리·유통 전담기관

· 국가연구개발사업 수행을 통해 창출된 화합물 및 관련 정보의 관리·유통체계 구축·운영 전담기관으로 지정되어 있습니다.(과학기술정보통신부 고시 제2022-41호)
· 국가연구개발혁신법 시행령 제33조 3항에 의하여 국가연구개발사업을 통하여 창출된 연구성과(화합물)는 연구개발성과 관리·유통 전담기관에 등록·기탁하도록 되어 있습니다.
· 한국화합물은행에 기탁된 화합물은 국가과학기술지식정보서비스(NTIS) 또는 범부처통합연구지원시스템(IRIS) 홈페이지에서 확인할 수 있습니다.

생명연구자원(신약소재 화합물) 기탁등록 보존기관

· 한국화합물은행은 「생명연구자원의 확보·관리 및 활용에 관한 법률」 제10조 규정에 따라 생명연구자원 기탁등록 보존기관으로 지정되어 있습니다.

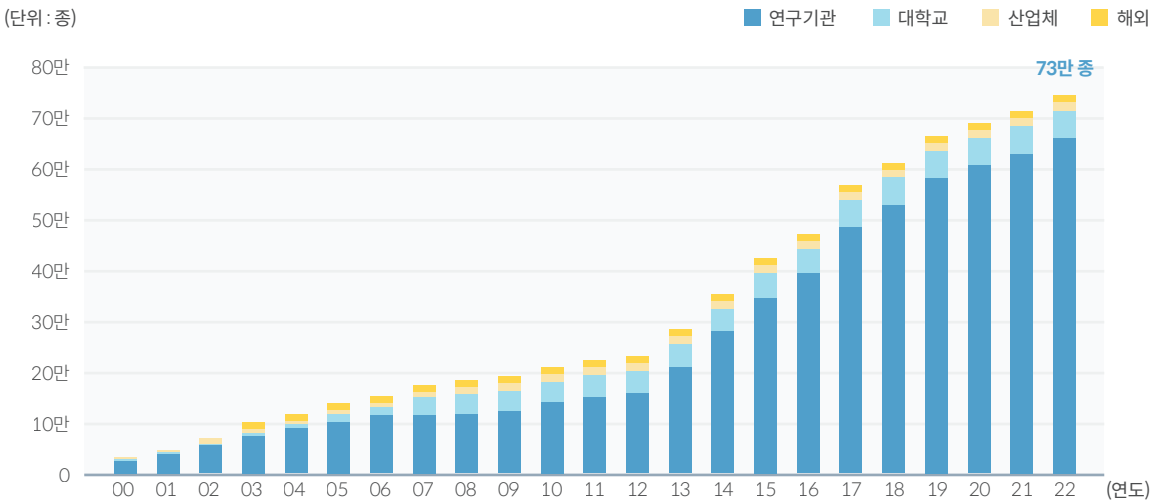
화합물 확보 현황

화합물 보유 현황

국내·외에서 수집된 73만종(2022년 12월) 신약소재 화합물 보유

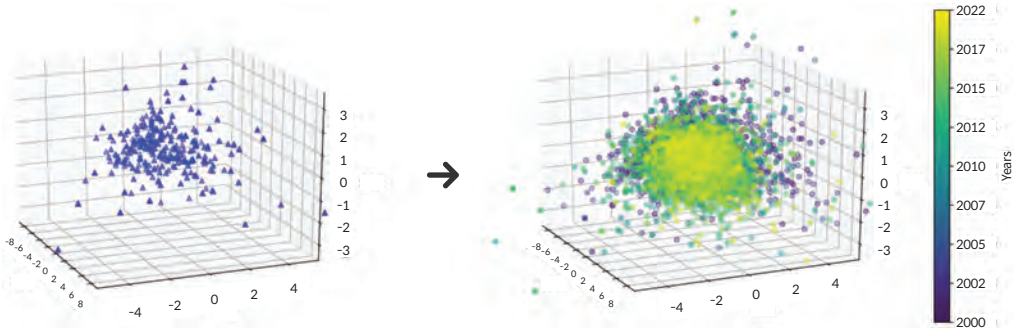
- 신약개발연구 과정에서 창출된 국내 고유 합성 화합물
- 생리활성 유기합성 화합물 및 단일성분 천연물
- 연구성과 기탁, 전문가 위탁합성, 특수골격 구매

화합물 확보 현황(누적)



화합물 다양성 증대

한국화합물은행 보유화합물의 구조 다양성 증가



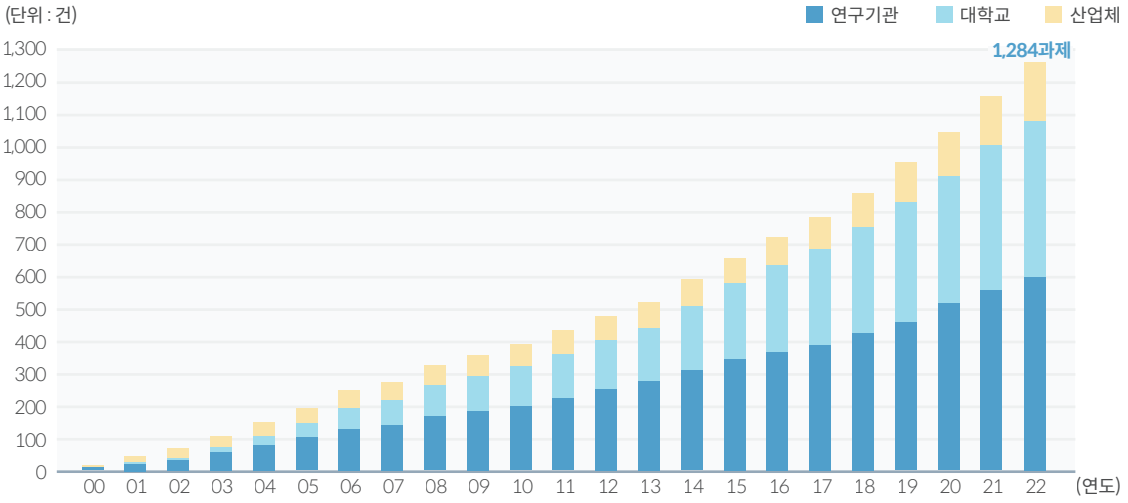
2000년 2022년

화합물 · 데이터 활용 현황

화합물 활용 현황

- 2022년 국내 산·학·연 246약효시험과제 지원(신규 126과제, 누적 1,284과제)
- 2022년 1,000,752개 화합물 제공(누적 1,000만개 이상 화합물 분양)

화합물 활용 과제수(누적)



최근 3년간 화합물 활용 현황

연도	활용과제 건수		화합물 분양 횟수		분양 화합물 개수	
	전체과제	신규과제	전체과제	신규과제	전체과제	신규과제
2020	223건	105건	414회	254회	479,332개	423,120개
2021	213건	116건	387회	238회	491,985개	340,996개
2022	246건	126건	442회	244회	1,000,752개	245,653개

데이터 활용 현황

산·학·연 맞춤형 데이터 활용 지원

73만종 화합물 및 840만건 이상 약효시험 데이터 중 공개가능한 정보 제공

연도	산업체	대학교	연구기관	누적 건수
2020	18건	5건	8건	31건
2021	13건	7건	9건	29건
2022	15건	7건	14건	36건

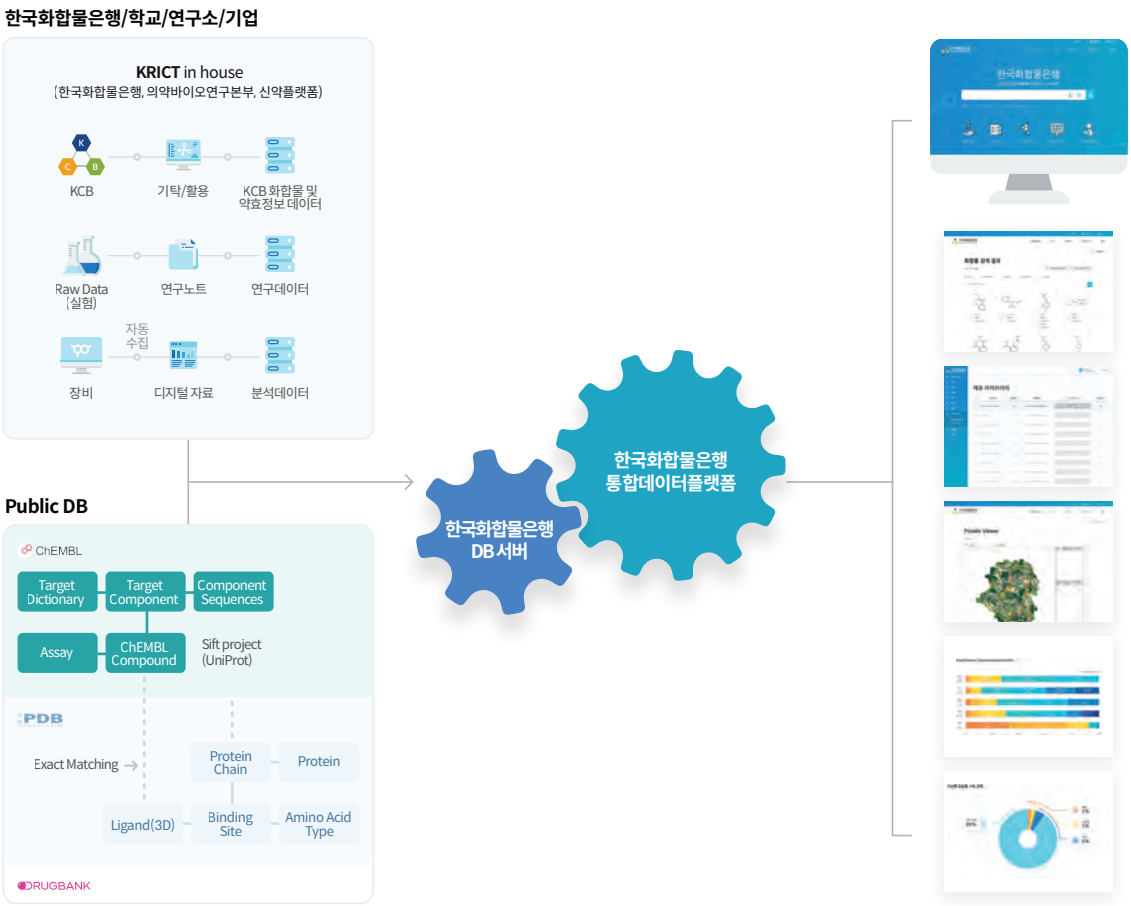
화합물·데이터 통합 관리 시스템

실물 및 정보 관리 자동화 시스템

· 화합물 기탁·활용 및 품질 관리 시스템 구축
· 바코드 기반 화합물 보관, 자동 선별 및 분주, 분양 시스템 구축
· 화합물 입·출고, 품질검증, 분양, 약효평가 결과 등 실물 자원 및 정보의 실시간 추적 관리

통합데이터플랫폼(korea.chembank.org)

· KCB 화합물 데이터와 외부 공공 데이터가 연계된 통합 데이터베이스
· 키워드(SMILES, 분자식, 약품명)/구조/특성/타깃/SDF 파일 등 다양한 검색기능 제공
· 단백질-리간드 결합 구조기반 가상탐색 자동화 서비스 제공
· 웹기반 화합물 기탁·활용 시스템 구축 및 서비스



분자모델링·화학정보학 기반 정보 제공

분자모델링 활용 유효물질 발굴지원

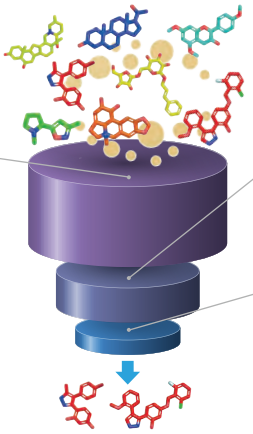
가상탐색을 이용한 유효물질 발굴

· 리간드 구조기반 가상탐색(LBVS)
· 타깃 단백질 구조기반 가상탐색(SBVS)
· *in silico* 기반 가상 라이브러리 DB 구축

약물 최적화를 위한 분자설계 기술

· 타깃 단백질에 대한 화합물의 결합 예측
· QSAR을 통한 구조-활성 상관관계 분석
· 모델 개발을 위한 분자표현자 제공

분자모델링 지원



Library Preparation and Design

· Physicochemical properties filter
· Focused library design
· Clustering
· ADME prediction

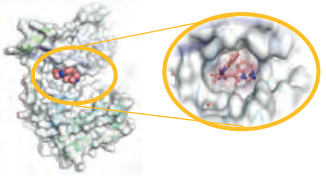
Virtual Screening

· Structure-based screening
· Ligand-based screening
· MD simulation

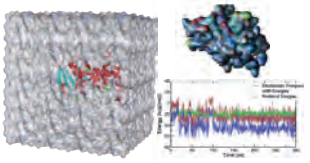
Prioritization

· Score and Pose analysis
· Clustering/Similarity analysis
· Visual selection

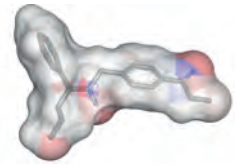
Molecular Docking Simulation



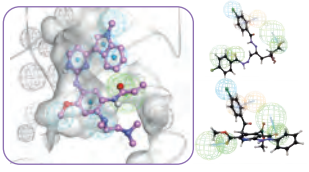
Molecular Dynamics Simulation



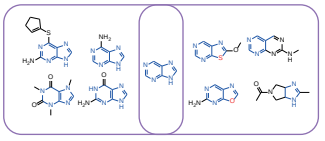
Shape Screening



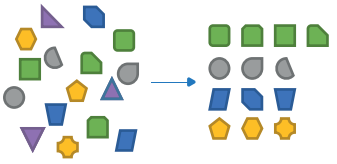
Pharmacophore Modeling



Substructure & Similarity Search

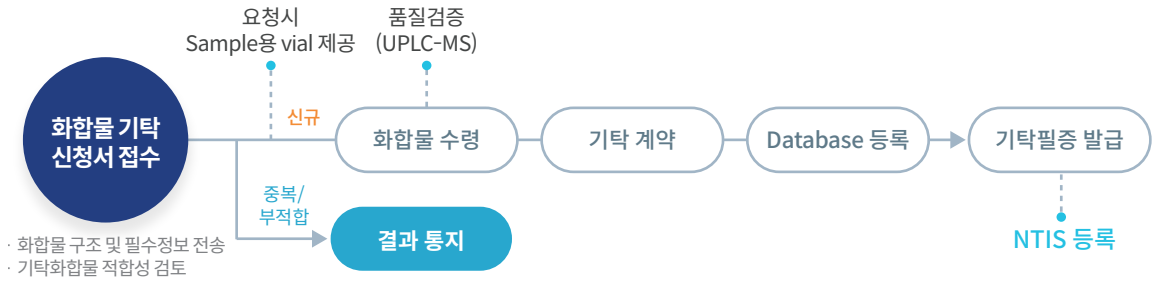


Clustering



화합물 기탁 절차

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



기탁화합물 범위 및 기준

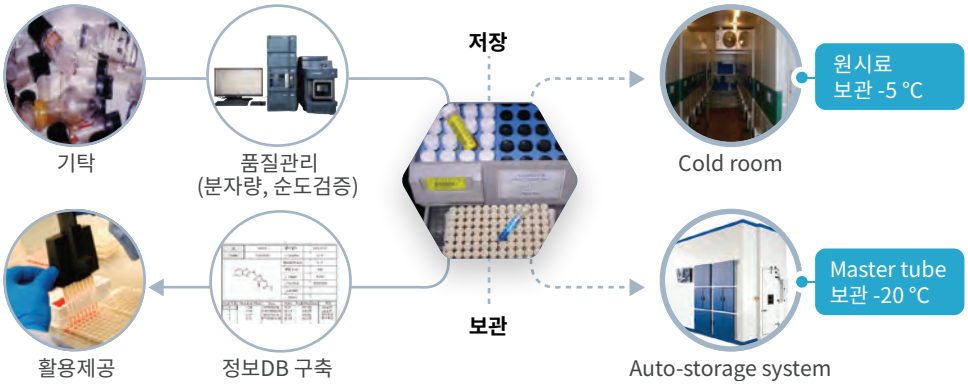
I 범위 유기합성 화합물 및 단일성분 천연물

I 품질기준 화합물 양 > 10 mg (권장), 순도 > 80% (한국화합물은행에서 UPLC-MS로 검증)
^{1}H-NMR 자료 제출

기탁자 혜택

· **기탁화합물에 대한 활용결과를 통보 받을 수 있습니다.**
· **기탁화합물의 활용결과 Hit이 도출된 경우**
- 활용자와 협의하여 후속연구에 공동연구자로 참여할 수 있습니다.
- 활용결과를 논문 또는 특허로 출판할 경우: 기탁자의 기여도에 따라 공동저자 또는 공동출원인으로 참여할 수 있습니다.
- 기탁화합물의 활용에 의한 수익이 발생할 경우: 기탁자의 기여도에 따라 수익의 일부를 분배 받을 수 있습니다.

화합물 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

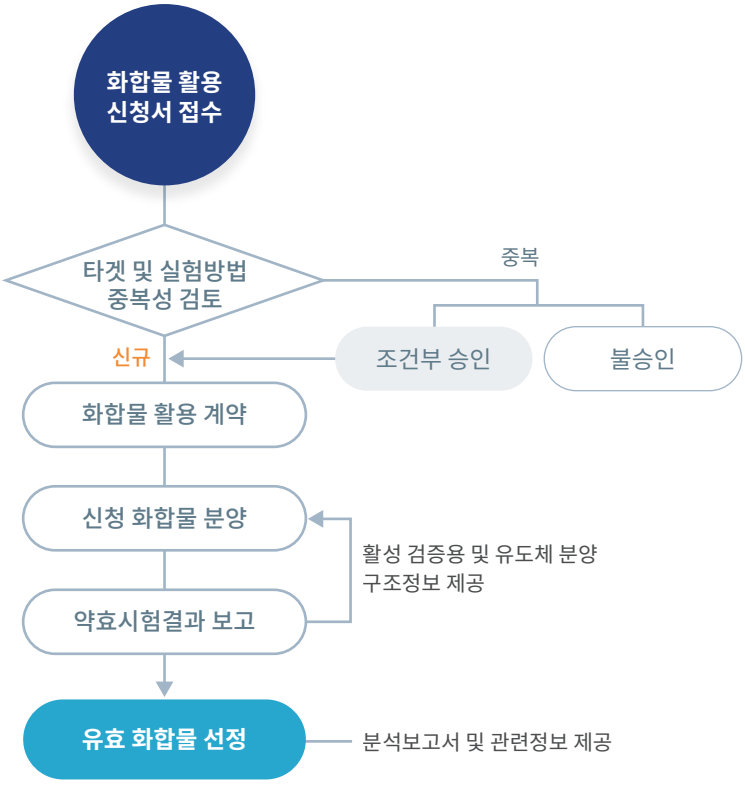
정보제공 데이터 종류

분류	소분류	
화합물 구조 정보	전체(분양 가능) 라이브러리	
	구매화합물 라이브러리	
	Focused 라이브러리	대표 라이브러리
		임상화합물 라이브러리
		천연물 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@krict.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

* 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.
· 2024년부터 화합물 분양실비 인상 예정입니다.

화합물 활용결과 권리관계 규정

규정목적

· 한국화합물은행은 기탁자들이 기탁한 화합물을 바탕으로 운영되고 있습니다.
· 기탁자들의 화합물 기탁을 장려하고, 동시에 화합물 사용자들의 불편함을 최소화하기 위하여 한국화합물은행이 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. 기탁자의 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 한국화합물은행의 라이브러리를 활용한 연구결과를 논문, 특허 등에 발표 또는 공개할 경우 "한국화합물은행 제공 화합물을 활용하여 연구가 진행되었다."는 사사 또는 문구를 기재하여야 합니다.
* 한국화합물은행은 화합물 활용에 관한 지적재산권(intellectual property)에 관여하지 않습니다.

> 한국화합물은행 활용결과의 권리 규정은
> 과학계에서 통용되는 연구결과 기여도에 대한 **"연구윤리 기본원칙"**을 따르고 있습니다.

후속연구를 위한 화합물 추가합성 및 구매 진행 안내

1. 한국화합물은행은 소량의 화합물(10 mg)만 기탁 받아서 보유하고 있으며, 최대한 많은 연구자들의 활용을 위해 1차 스크리닝 및 Hit화합물의 검증에 필요한 최소량만 제공하고 있습니다. 진전단계(*in vivo* 실험 및 약물성/독성 시험 등) 실험에 필요한 충분한 양의 화합물은 서비스하고 있지 않습니다.

2. 진전단계 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. 한국화합물은행(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)

화합물 활용 연구성과

한국화합물은행 제공 화합물을 활용한 연구결과를 기반으로 다수의 신약개발 과제 도출 (50과제 이상)

한국화합물은행 제공 라이브러리를 활용하여 발표된 논문 (연 20건 이상)

기여 사례

2021	다중약제내성 항박테리아 화합물 : 국내기업 기술이전
2020	항바이러스 치료조성물 : 국내기업((주)나이벡) 기술이전
2020	라이노바이러스 치료제 후보물질 개발 : 국내기업((주)아름테라퓨틱스) 기술이전
2020	코로나 치료제 후보물질 개발 : 국내기업((주)레고켐 바이오사이언스) 기술이전
2019	B형 간염 치료제 후보물질 개발 : 국내기업 기술이전
2018	대장암 표적 치료 선도물질 개발 : 글로벌 인큐베이터(FutuRx) 기술이전
2017	퇴행성 뇌질환 및 암질환 치료제 후보물질 개발 : 국내기업 기술이전
2016	대사질환 치료제 후보물질 개발 : 국내기업 기술 이전
2015	항암제 후보물질 개발 : 국내기업 기술이전
2014	바이러스치료제(HRV) 후보물질 개발 : 다국적제약사(Novartis) 기술이전
2013	녹내장치료제 후보물질 개발 : 국내기업(국제약품) 기술이전
2012	비만/당뇨 치료제 후보물질 개발(DGAT1) : 국내기업(한독약품) 기술이전
2011	신개념 골다공증치료제 후보물질 개발(TAZ) : 국내기업(신풍제약) 기술이전
2011	지방세포 선택적 형광표지제 개발 : 국내기업 기술이전

전체 Library

화합물 수 : 73만종

기본 제공량 : 5 μL
(DMSO 용액, 평균농도 5 mM)

KCB Library

대표 Library

· 화합물 수 : 7,000종
· 라이브러리 구성
전체 화합물의 구조를 대표하는 라이브러리,
순도 및 분자량 검증 (UPLC-MS),
Eye filtering

임상 Library

· 화합물 수 : 3,200종
· 라이브러리 구성
임상 Ⅰ - Ⅲ 상 단계 화합물 및 승인
약물(Clinically applied compounds)

천연물 Library

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

Fragment Library

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

Kinase Library

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

PPI Library

· 화합물 수 : 17,000종
· 라이브러리 구성
해외 vendor로 부터 선별 구매화합물

GPCR Library

· 화합물 수 : 8,600종
· 라이브러리 구성
해외 vendor로 부터 선별 구매화합물

PharmaCore Collection

· 화합물 수 요청개수
· 라이브러리 구성
특정 골격검색 또는 분자모델링 방법으로
선별한 수요자 맞춤형 화합물

FAQ

기탁

Q 연구성과(화합물) 기탁제도는 무엇인가요?

연구성과의 체계적인 관리와 공동활용을 위하여 국가연구개발혁신법에 의거 국가연구개발사업을 통하여 창출된 화합물(저분자 유기합성화합물 및 단일성분 천연물)을 전담기관에 의무적으로 기탁하는 제도입니다. 기탁된 화합물은 전담기관에서 체계적으로 보존·관리되어 국내 산·학·연 신약개발 연구자들이 공동활용할 수 있도록 지원합니다.

Q 화합물은 어디에 어떻게 기탁하나요?

한국화합물은행은 화합물 분야 연구성과 관리·유통 전담기관으로 지정되어 있습니다.
한국화합물은행에 연락을 주시면 화합물 보관용 용기(vial, rack)를 보내드립니다. 화합물 기탁이 완료되면 '화합물기탁필증'을 발급합니다. 이 기탁필증을 과제 평가시 또는 보고서 제출시에 첨부하시면 됩니다.

Q 어떤 화합물을 얼마나 기탁하여야 합니까?

한국화합물은행에서는 신약으로 개발 가능성이 높은 유기합성 화합물 및 단일성분 천연물을 기탁받고 있습니다. 화합물은 순도 80% 이상 및 10 mg 이상을 기탁 받습니다. 천연물의 경우 단일성분만을 기탁 받습니다.

Q 기탁된 화합물은 어떻게 활용 되나요?

기탁된 화합물은 순도와 분자량을 확인한 후 -5 °C 저온창고에 보관되고, 일정량의 화합물은 DMSO 용액으로 제조하여 -20 °C Autostorage에 보관됩니다. DMSO 용액은 화합물 활용기관에 분양되어 신약개발과 BT 연구를 위한 약효 스크리닝에 활용됩니다.

Q 화합물을 기탁하면 기탁자에게 어떤 혜택이 있나요?

기탁된 화합물은 전담기관에서 체계적으로 관리되어 국내 연구자라면 누구나 활용할 수 있습니다. 기탁 화합물이 약효시험에 활용되어 활성을 나타내는 경우 활용자와 협의하여 신약개발연구에 참여하거나 상업적 이익이 발생할 경우 이익을 분배 받으실 수도 있습니다.

활용

Q 한국화합물은행 보유화합물은 어떻게 활용할 수 있나요?

한국화합물은행에 화합물 활용신청서를 제출하시면 기 수행중인 약효시험과의 중복성 및 적합성을 검토한 후 요청 화합물이 제공됩니다.
- 화합물 제공량 및 방법 : 한국화합물은행 홈페이지 참고
- 화합물 활용 신청 : 통합데이터플랫폼((korea.chembank.org)

Q 특정 골격의 화합물을 선택하여 약효시험을 수행할 수 있습니까?

통합데이터플랫폼(korea.chembank.org)에서 검색→구조 검색→구조 그리기→substructure 검색하기를 통해 특정 골격 구조를 검색할 수 있습니다.
로그인(NTIS ID 연계)후 마이라이브러리 기능을 통해 검색 화합물을 저장할 수 있으며 화합물 활용신청이 가능합니다.

Q 한국화합물은행에서 직접 화합물을 합성하거나 약효시험을 수행합니까?

한국화합물은행은 화합물을 합성하거나 약효시험을 하지 않습니다.
Hit 평가를 위해 화합물의 추가 확보가 필요한 경우 기탁자 정보 또는 구매처 정보를 제공합니다.

Q 기 수행중인 약효시험과 동일한 작용점인 약효시험이 신청되는 경우에는 어떻게 됩니까?

동일한 작용점의 약효시험인 경우에도 시험방법이나 활용되는 화합물이 상이하여 서로 다른 Hit가 발생할 가능성이 있는 경우에는 화합물 제공이 가능합니다. 단, 지적재산권의 충돌을 피하기 위해 화합물 제공이 제한 또는 거절될 수 있습니다.

데이터

Q 데이터는 어떻게 제공받을 수 있나요?

데이터 활용 계약서와 신청서를 보내주시면 적합성 검토 후 제공됩니다.
데이터는 USB로 제공되며, 비용은 무료입니다.
(정보제공 데이터 종류는 한국화합물은행 홈페이지 참고)

기타

Q 화합물의 활용결과를 이용해 특허출원을 진행하고자 하는데 어떤 절차가 필요한가요?

한국화합물은행의 화합물은 기 공지된 물질로 물질특허가 없는 경우에도 물질특허 취득이 제한됩니다. 물질특허가 있는 경우에는 용도특허 출원이 가능합니다. 또한 Hit구조를 최적화하여 특허성이 있는 물질 개발은 자율적으로 진행할 수 있습니다. 한국화합물은행에는 특허출원 사실을 공지해 주시고, 청구항 이외의 명세서 부분에 한국화합물은행 라이브러리를 활용하였다는 내용이 포함되는 것을 권장합니다.

과학기술정보통신부지정
연구성과 관리·유통 전담기관
- 화합물 전담기관 -

국가연구개발사업 수행을 통해 창출된 연구성과 중
화합물 및 관련정보의 관리·유통체계 구축·운영
전담 기관으로 지정되어 있습니다.
[과학기술정보통신부 고시 제2022-41호]

한국화합물은행
Korea Chemical Bank

(우.34114) 대전광역시 유성구 가정로 141 한국화학연구원 한국화합물은행
Tel. 042-860-7190 **Fax.** 042-860-7096 **E-mail.** chembank@krict.re.kr **Web.** www.chembank.org **통합데이터플랫폼.** korea.chembank.org