

中国医学科学院药物研究所样品库化合物对外 共享管理办法（试行）

第一章 总则

第一条 为规范中国医学科学院药物研究所（以下简称“药物所”）样品库化合物管理，推进创新药物和新靶点发现研究，为源头创新药物发现奠定物质基础和重要支撑性平台，药物所样品库特拟定《中国医学科学院药物研究所样品库化合物对外共享管理办法》（试行），本办法将充分体现服务性和公益性，在有力保障知识产权的前提下，与各科研单位实现资源、信息和利益共享，进而提升我国在药物创新领域的核心竞争力。

第二条 本办法所指的共享化合物实行“集中存储、专业管理、开放共享”的原则，在满足药物所课题组的教学、科研需求的前提下，应同时为具有筛选能力的社会用户（包括医科院体系内科研院所、国内外高等院校、科研院所和医药企业。）提供共享服务，实现资源共享，充分发挥使用效益。

第二章 组织机构与职责

第三条 药物所样品库负责管理化合物样品，对具有筛选能力的所内课题组和所外科研单位实行化合物开放共享，主要职责包括：

(一) 日常维护样品存储设备，每日检查温、湿度，以保障化合物样品的安全存储。

(二) 建立药物所样品库化合物对外共享管理平台，并制定化合物共享管理办法。

(三) 负责化合物出入库管理，对入库化合物严格把关，从化合物成药性、结构多样性角度出发，挑选骨架新颖、结构稳定的化合物，以保证共享化合物的成药价值。

(四) 负责化合物相关化学和生物信息的管理。

(五) 为用样单位（课题组）保守技术秘密。

第四条 对用样单位（课题组）的要求：

(一) 用样单位（课题组）从样品库申领的化合物只能在本实验室范围内使用，不得将样品用作与筛选无关的其他用途，不得复制样板，不得转借给第三方。

(二) 用样单位（课题组）需提交化合物筛选报告，未经药物所样品库同意，不得将申领样品有关的任何资料和信息泄露给第三方。

第三章 共享机制

第五条 化合物库在新药研发中的潜力由实物库的规模质量、数据库的高效可用性决定。随着化合物库的持续建设发展，扩容提质、增强内外服务功能将成为医科院和我国创新药物研发的重要源泉。药物所将建成近百万级化合物库，包括所内自主研发化合物和通过购买或合作等形式获得的外来化合物。按化合物类型可分为小分子合成化合物、天然产物和衍生物、已上市或临床期药物等。

第六条 在保障知识产权和互惠互利的前提下组成战略联盟，建立化合物库共享机制，使科研资源得以最大化的利用，以拓展发现活性化合物的机遇。

具体的共享机制如下：

(一) 对化合物库中通过购买等商业途径有偿获得的样品作为公共资源对社会开放。药物所课题组可免费申领化合物样品，所外用样单位需支付适当的样品费。如果发现先前未知的生物活性，其知识产权归属申领单位。在其发表论文和申报成果时，应标明化合物来源于药物所样品库。

(二) 对于化合物库中具有药物所自主知识产权的化合物样品，信息不对外公开，样品实物可免费提供给药物所生物学科课题组进行活性筛选。所外单位如需申领，可与化合物归属课题组

协商，以合作开发的形式签订相关合作协议（可参考“药物所化合物合作协议书”模板）。任何由此产生的知识产权由各利益攸关方协商共享。

（三）研究机构和医药企业除了可以从化合物库中申领样品进行活性筛选外，也可将化合物提供给化合物库，药物所可提供免费存储并将化合物样品加入筛选平台中，在化合物样品和筛选模型这两个层面上互通有无，共生共长。

（四）对所有以合作和捐赠形式入库的样品应遵守相关的合作或捐赠协议，既不公布化合物信息也不开放申领使用。研究机构和医药企业可以通过与样品的实际拥有者开展合作的方式来达到使用目的。此类合作将充分考虑所涉及药物作用靶点的先进性、成熟性和成药性，对原有合作或捐赠单位的合法承诺以及所选化合物的现有存量及消耗限制等因素，以个案形式进行申请、审核和实施。任何由此而产生的知识产权由各利益攸关方协商共享。

第四章 化合物申领流程

第七条 对化合物结构无特定要求，拟批量申请化合物的，申领样品前需先填写筛选模型信息表，待药物所审核通过后，再填写化合物申领单，提交出库申请。

第八条 拟开展虚拟筛选的申领人可先填写“药物所样品库公开化合物信息申请表”，待药物所审批通过后，样品库工作人员

将相关化合物结构式信息提供给申领人，之后再根据虚拟筛选结果申领样品实物。

第九条 用样人需按申领单或协议中规定的时间返回筛选报告；若未及时提交，样品库将对用样单位（课题组）停止供样，至提交报告后解除；若延期返回报告超3次的，样品库此后将不再给该用样课题组或单位提供样品。

第五章 收费标准

第十条 本办法规定的收费标准只针对第六条（一）中涉及的公开化合物样品，其它化合物的提供方式以双方签订的合作协议为准。

第十一条 根据非盈利原则，化合物库对药物所内课题组免费提供样品；对医科院内其他单位只收取样品成本费；对医科院外单位收取样品成本费加适当服务费。所收取的费用纳入药物所预算，由药物所统一管理。

第十二条 化合物样品成本是根据样品库入库化合物的购买费用及出库所用试剂、耗材、人工等费用测算所得。

（一）批量样品申领（整板申领，分96孔板和384孔板两类，每板分别为80个或320个化合物，样品浓度为10 mM），费用标准如下：

1. 天然产物（衍生物）化合物：院内单位5元/ μ L/个；

院外单位 7.5 元/ μL /个。

2. 合成小分子化合物：院内单位 1-2 元/ μL /个；院外单位 2-3 元/ μL /个。（根据外购库成本、库存量等定价可有浮动）

3. 上市药物（或临床期药物）：院内单位 2 元/ μL /个；院外单位 3 元/ μL /个。

4. 手续费每次 200 元。

（二）零星化合物申领

为避免样品过度消耗，在申领人基于化合物样品库已公开的化合物开展虚拟筛选后申请领用零星化合物，因单个挑选操作繁琐，耗材、人工费用较高，因此样品成本也较高，将不再区分用样单位性质，只按样品类别和个数统计费用，标准如下：

1. 天然产物（衍生物）： 10 元/ μL /个（浓度 10 mM）；
2. 合成化合物或上市药物： 5 元/ μL /个（浓度 10 mM）；
3. 手续费每次 200 元。

第六章 附则

第十三条 本办法自印发之日起施行，由药物所样品库负责解释。