

## 정량적 구조-활성 상관분석 및 Docking을 통한 화장품용 신소재 개발

김상진\*

대전보건대학 화장품과학과

(kim@hit.ac.kr\*)

화장품관련 교재를 보면 대부분 화장품보다는 피부의 구조에 대한 내용부터 기술되어있다. 화장품의 기본적인 여러 역할 중에서 가장 큰 비중을 차지하는 것은 피부의 기능을 보완하는 것이며, 이러한 역할을 하는 것이 기초 화장품이기 때문이다. 피부의 구조에는 화장품용 기능성소재를 개발할 수 있는 원리가 숨어있다. 가장 일반적으로 많이 알려져 있는 것은 멜라닌 생성을 촉진하는 tyrosinase 활성저해에 대한 연구 결과이다. Tyrosinase에 대한 지금까지의 연구는 주로 알부틴과 같은 경쟁적 저해제와 Kojic acid와 같은 비경쟁적 저해제에 대한 연구 및 tyrosinase의 생합성 저해에 대한 연구 이나 후자는 side effect에 대한 안전성 문제로 아직까지는 진척이 없는 편이다. 화장품용 신소재의 개발은 대부분 천연물로부터 활성성분을 탐색하여 사용하고 있는데 너무도 많은 시간과 노력이 요구된다. 하지만 QSAR은 신소재 개발의 가능성을 크게 향상시켜주고 있으며, 최근 도입된 Docking 방법은 화장품용 신소재 개발대상을 천연물에서 컴퓨터로 바꾸어 놓았다. 이에 저자들은 피부의 구조가 우리에게 주는 의미와 QSAR 및 Docking을 통한 신소재 개발과정을 소개하고자 한다.