

제목	인실리코 활용 기능성 연구
내용	<p>식량작물은 우수한 영양 공급원일 뿐 아니라 다양한 파이토케미컬을 함유하고 있기에 기능성 식의약 소재로서의 가치 또한 크다.</p> <p>그러나 기능성 식의약 소재의 개발은 물질의 분리 동정, 기능성 및 안전성 검증, 인체적용시험 등에 필요한 인적, 물적 비용이 크기 때문에 연구의 제한사항이 되고 있다. <i>In silico</i> 기술은 다수 축적된 <i>in vitro</i>, <i>in vivo</i> 데이터와 인공지능을 통해 컴퓨터 상에서 생물활성을 예측하는 기술로서 앞서 서술한 문제점의 해결책이 될 수 있다. 정량적구조활성관계(Quantitative Structure-Activity Relationship; QSAR)는 구조유사체의 데이터베이스를 이용해 신규물질의 흡수(absorption), 분포(distribution), 대사(metabolism), 배설(excretion), 독성(toxicity)과 같은 생리활성을 예측할 수 있다. 분자도킹(Molecular docking)은 ligand와 protein의 결합모드(binding mode)를 계산하는 기술로서 효소 저해제(inhibitor) 탐색과 같은 분야에 활용되고 있다. 그러나 이러한 <i>in silico</i> 기술은 사용하는 프로그램, 매개변수(parameter)에 따라 결과 값이 다르며, 실제값과 차이를 보이는 등의 한계를 가지고 있다. 따라서 <i>in silico</i> 기술의 효율적 활용을 위해서는 <i>in vitro</i> 등 실제 값과 상관성 높은 매개변수 설정 등 분석 기법의 세밀한 설정이 요구된다. 지속적 연구를 통해 이러한 <i>in silico</i>의 제한점을 점차 해소시켜 나간다면 이 기술은 많은 시간과 비용이 소요되는 기능성 연구의 문제점을 해결할 수 있는 중요한 열쇠가 될 것이라 판단된다.</p>
출처	<ol style="list-style-type: none"> 1. Kwon SY, Bae H, Jo JH, Yoon SR. Comprehensive ensemble in QSAR prediction for drug discovery. BMC Bioinformatics 20:521, 2019. 2. X. Y. Meng, H. X. Zhang, M. Mezei, M. Cui. Molecular Docking: A powerful approach for structure-based drug discovery. Curr Comput Aided Drug Des 7:146-157. 2011.
제출자	수확후이용과 농업연구사 이진영 (031-695-0606)