

# GC/MS와 data system을 이용한 한국산 향각미종 잎담배의 정유성분 분석

박진우 · 이운철 · 김용태 · 허 일

한국인삼연초연구소 분석 연구실

## Analysis of Essential Oils from Korean Aromatic Tobacco Varieties by GC/MS and data system.

Jeen Woo Park, Un Chul Lee, Yong Tae Kim and Il Heu

Lab. of Analysis.

Korea Ginseng and Tobacco Research Institute, Seoul, Korea

(Received Mar. 29, 1982)

### Abstract

Essential oil components were isolated from Korean aromatic tobaccos by using a simultaneous distillation and extraction apparatus. The essential oils were analyzed by GC/MS and data system. Forty-two volatile components were identified on the basis of their mass spectra.

Determination of contents of essential oil components from Hyangcho and Sohyang was achieved by pseudo-multiple ion selection (MIS) technique. Varietal differences were detected from the quantitative comparison of the MIS data.

### 서 론

담배의 정유성분은 잎담배의 향취에 관련이 크고  
직연시 담배연기와 함께 추출되어 껍미에도 영향을  
준다. (1, 2)

그러나 정유성분은 매우 복잡적이고 각 성분들의  
화학적 다양하여 분리 및 확인이 용이하지 않다.

(5) 정유성분의 분리를 위해서는 수증기 증류의 여  
러가지 변형된 장치들이 사용되어 왔으나 (6, 7) 본  
연구에서는 재현성 및 수율을 고려하여 Flath등(3)이  
papaya 잎의 향을 분리하기 위해 사용한 Simultane-  
ous distillation and extraction apparatus (SDA) 를  
이용하였다. SDA로 국내산인 향초, 소향의 정유성  
분을 분리하고 얻어진 정유의 주요성분들을 GC/MS  
로 확인한후 data system으로 확인된 성분들을 정량  
함으로써 한국산 향각미 잎담배들의 향기성분과 그  
향기성분의 품종간의 상이점을 밝혔다.

### 재료 및 방법

#### 1. 잎담배 시료 및 시약

1981년에 수입된 Turkish Izmir(B/G) 및 1981년도  
국내산인 향초(Tip), 소향(Tip)의 1차 건조한 시료  
를 60°C에서 재건조하고 분쇄한후 16mesh 체를 통과  
시켜 갈색시료병에 넣은후 냉암소에 보관하였다. 추  
출용매인 diethyl ether은 GR 급인 Merck 제품을 사  
용하였다.

#### 2. 정유성분의 분리

SDA 의 1ℓ 플라스크에 증류수 400ml와 잎담배  
시료 20g을 넣고 500ml 플라스크에는 diethyl ether  
100ml를 넣은후 6시간 동안 동시추출하였다. 6시간  
후 ether층만 취하여 상온에서 ether를 증발시키고

남은 정유에 1 ml의 diethyl ether를 가하여 분석시료로 이용하였다.

### 3. GC/MS에 의한 정유성분 분석

GC/MS는 Varion 3700GC에 open split로 연결된 Varion MAT 212MS를 사용하였다. GC/MS에서의 GC조건으로 column은 SE-54 glass capillary(20 × 0.25mm-i.d), carrier gas인 helium의 flow rate는 1.2 ml/min, oven 온도는 40℃에서 30초 동안 유지시킨후 100℃까지 10℃/min 그리고 200℃까지 5℃/min 로 증가시켰다. Injection은 1 μl를 splitless mode로 주입하였다. MS 조건은 ion source pressure는 1.8 × 10<sup>-5</sup> torr, ionizing voltage는 70eV, emission current는 1 mA, electron impact ionization 그리고 ion source 온도는 220℃등이다. 이러한 분석조건에 의해 얻어진 각 성분을 확인하기위해 GC/MS에 연결된 SS MAT 188 data system을 이용하여 Biemann Library Research (4)로 성분을 확인하였다.

### 4. 정유성분의 정량

확인된 정유성분의 정량은 data system을 이용하였는데 GC/MS 분석에 의해 얻어진 scanned data를 각 성분의 molecular ion에 해당되는 selective mass monitoring data로 전환하여 각 mass monitoring에서 얻어진 peak들의 area를 계산하여 각품종의 각성분에 대해 상대적인 비를 구하였다.

### 결과 및 고찰

정유성분의 분리는 주로 steam distillation 방법이 이용되어 왔으나 이 방법은 많은 시료가 소요되고 수율이 적으므로 여러가지 변형된 장치 및 방법들이 보고 되어왔다(6, 7). SDA 장치는 distillation과 extraction이 동시에 이루어지고 closed system이므로 steam distillation 방법보다 재현성이 우수하고 소량의 시료로도 분석가능한 정유를 분리 할 수 있다.

SDA에 의해 분리된 향초, 소향의 정유성분을 GC/MS로 분석한 결과 얻어진 total ion current (TIC) chromatogram은 그림 1, 그림 2와 같다.

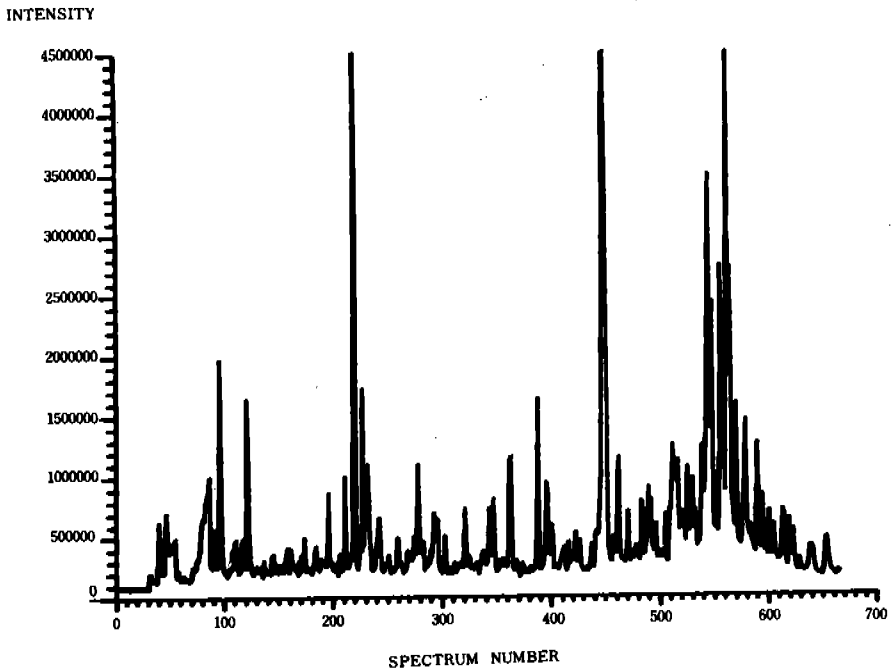


Fig. 1. Total ion current (TIC) chromatogram of essential oils from Hyangcho.

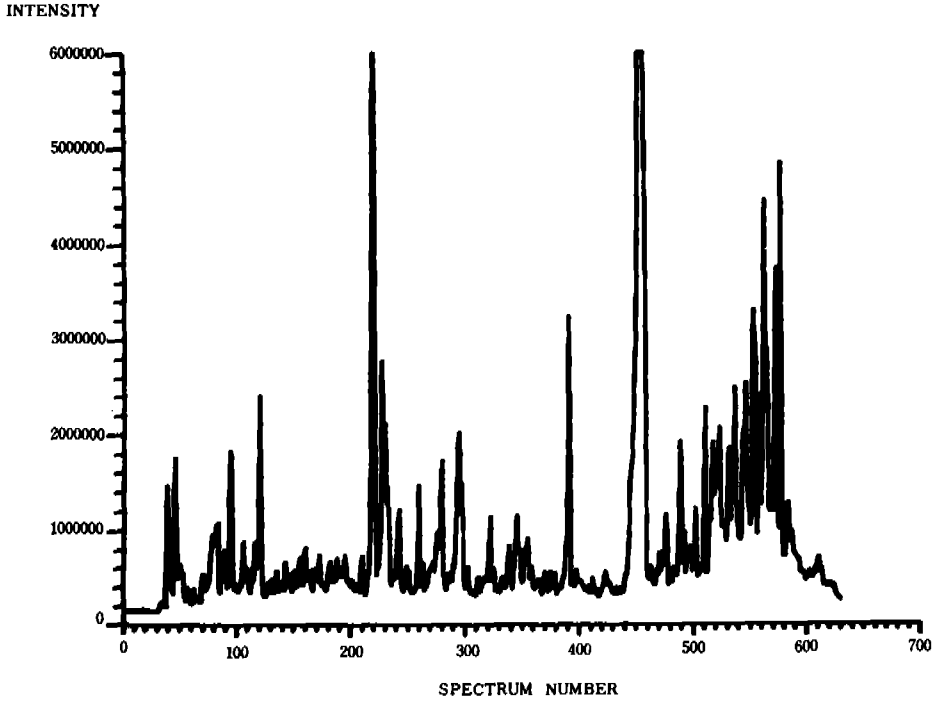


Fig. 2. TIC chromatogram of essential oils from Sohyang.

Chromatogram에서 볼수있듯이 담배의 정유는 매우 복잡한 성분들로 구성되어 있다. 각 정유성분의 확인을 Biemann Library Research 로 시도하여 42개의 성분을 확인한 결과가 표 1과 같다.

Table 1. Identified essential oil components from Korean aromatic tobaccos.

Compound number	Spectrum number (Sohyang)	Compound	Content ratio (Hyangcho / Sohyang)
1	40	2-Furanocarboxyaldehyde	0.71
2	51	Furfural alcohol	1.68
3	63	Artificial almond oil	0.66
4	70	6-Methyl-5-heptene-2-one	0.87
5	96	Benzenemethanol	1.60
6	107	Hex-5-enoic acid	1.72
7	111	3-Ethyl-2-methyl-1-penten-3-ol	0.98
8	114	Methylpyrrol-2-yl ketone	0.50
9	122	Phenyl alcohol	0.77
10	160	p. $\alpha$ -Dimethyl-benzylalcohol	0.89
11	181	Methyl-2-phenylnonanate	0.50
12	195	N-tert-butyl-3-methoxy benzamide	2.50
13	209	1, 7, 7-Trimethyltricyclo[2,2,1,0 <sup>26</sup> ]heptane	2.27

14	219	Solanone	0.97
15	226	$\beta$ -Damascenone	0.80
16	231	Cedr-8 (15)-ene	0.68
17	239	Tricyclo [4, 3, 0 <sup>7</sup> , 9] nonane	0.67
18	256	Trans-geranylacetone	0.31
19	268	6, 6, 3, 4-Undecadiene-2, 10-dione	0.99
20	275	6, 7-Diethyl decahydro-cis-1, 4-methanonaphthalene	0.64
21	279	Hexahydrobenzylacetone	0.52
22	290	Octahydro-4A, 5-dimethyl-3- (1-methyl ethyl) - (3 $\alpha$ -methyl) -1 (2H) -naphthalenone	0.68
23	295	5, 6, 7, 7 $\alpha$ -Tetrahydro-4, 4, 7 $\alpha$ -trimethyl-2 (4H) -benzofuranone	0.59
24	309	Isovelleral	0.90
25	318	9- (1-methylidene) -1, 5-cycloundecadiene	0.96
26	319	2, 4, 5-Trimethyl-5-benzofuranoacetic acid	0.97
27	334	2 (4 $\alpha$ H) -Cyclopropa [d] naphthalene	0.40
28	382	4, 8-Dimethyl-1, 7-nonadiene	3.31
29	447	1, 1'-Hexadecyide cyclopentane	0.71
30	468	3, 7, 11-Dodecatriene-3-ol	1.10
31	480	Farnesyl acetone	0.87
32	483	13-Methyl-pentadecanoic acid, methyl ester	1.87
33	500	9, 15-Octadecadienoic acid, methyl ester	1.82
34	514	n-Hexadecanoic acid	0.67
35	528	17-Hydroxy-2, 4-androstane-3-one	0.88
36	560	2-Bromooctadecanal	2.61
37	564	Phytol	0.83
38	575	3, 7-Dimethyl-6-octen-1-ol , propionate	1.16
39	581	8, 11, 14, Docosatrienoic acid, methyl ester	1.25
40		C <sub>25</sub> H <sub>52</sub>	
41		C <sub>26</sub> H <sub>54</sub>	
42		C <sub>27</sub> H <sub>56</sub>	

Compound No. 40, 41 및 42의 3 hydrocarbons는 GC의 column 온도를 240°C까지 증가시켰을 때 확인할 수 있었다. 확인된 42개 성분들은 aliphatic hydrocarbon과 그 유도체, terpene계 화합물, heterocyclic 화합물등 이었다. 특이한 것은 확인된 성분중 비교적 retention time이 작은, 즉 휘발성이 큰 성분가운데 fulfural alcohol, 2-furanocarboxyaldehyde등 향kick미보다 헝kick미에 관련된 성분이 유출됨을 볼수 있었다.

담배의 정유성분과 같이 복잡한 혼합물의 경우 Biemann Library Research에 의한 성분확인에는 크

게 2가지 문제점이 대두된다. 즉 각 성분들이 baseline 분리가 되지 못함으로써 인접화합물의 spectra가 겹쳐지는 경우와 Library (NIH (EPA))의 spectra 저장시 data 저장공간을 절약하기위해 적은 mass peaks가 생략되므로 성분의 확인 결과가 불분명한 경우가 있다. 본 연구에서는 이러한 문제점을 고려하여 비교적 정량적으로 특징적이고 분리가 잘된 성분에 대해 확인 및 정량을 시도하였다.

동일한 방법에 의해 얻어진 향초, 소향의 chromatogram인 관련 retention time에 해당하는 각 peak의 mass spectrum을 서로 비교한 결과 품종간의 정

성적 차이는 거의 발견할 수 없었다. 또한 orient 산  
향기미종인 Turkish Izmir의 chromatogram과 국내  
산을 동일한 방법으로 비교하였을때도 국내산과 Or-

ient종 간의 현저한 정성적인 차이점은 발견할 수 없  
었다

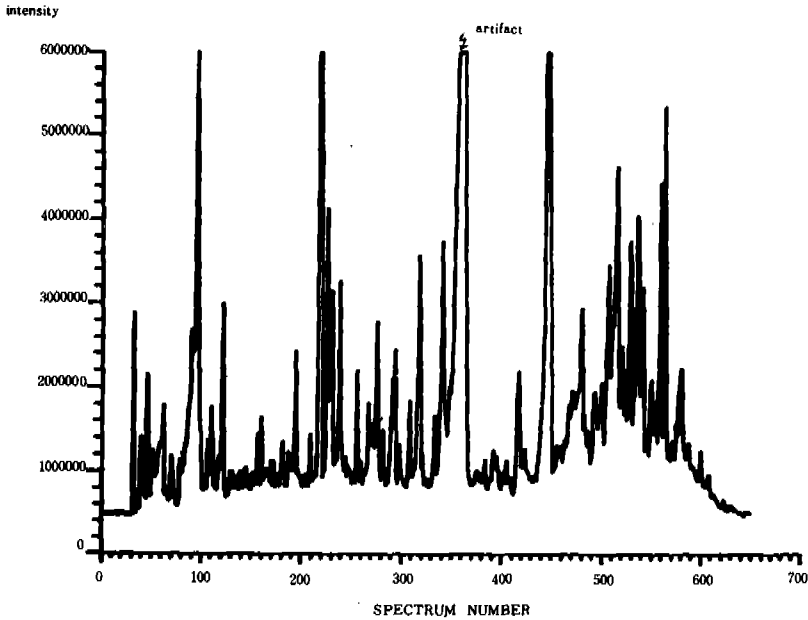


Fig. 3. TIC chromatogram of essential oils from Turkish Izmir.

각 정유성분의 함량과 품종간의 상관성을 추적하  
기 위해 확인된 각 성분의 상대적인 정량치로 data  
system을 이용해서 구하였다. 그림 4는 scanned da-  
ta를 selective mass monitoring data로 전환한 ben-  
zenemethanol의 multiple ion selection plot이다.

이 방법은 baseline drift, 인접 peaks 간의 분리등  
의 문제점을 용이하게 제거할 수 있으므로 GC에 의  
한 정량보다 재현성이 큰 장점이 있다. 이러한 방법  
으로 얻어진 각 성분의 상대 정량치를 소향, 향초간  
비교한 것을 표 1에서 볼수있다. 2 품종간에는

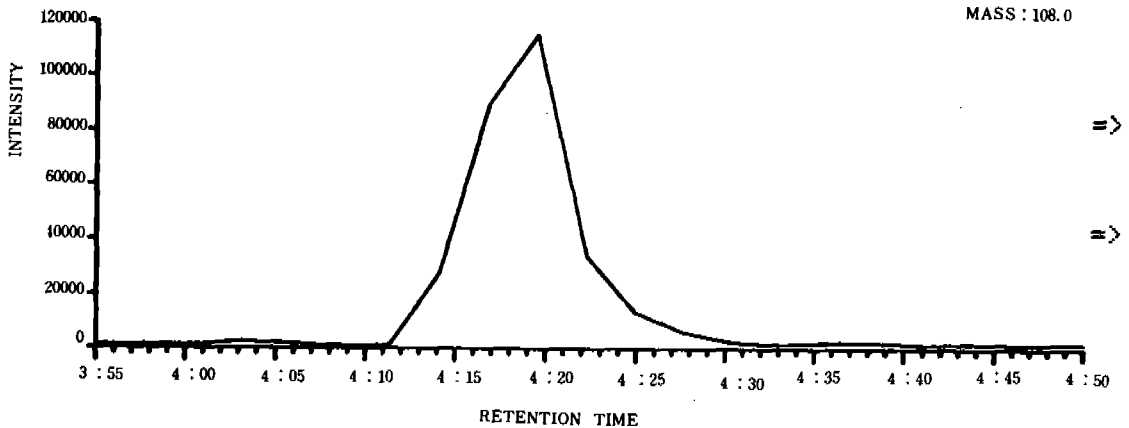


Fig. 4. Multiple ion selection plot of benzenemethanol.

N-Tert-butyl-3-methoxyberizamide(No. 12), 1, 7, 7-Trimethyl-tricyclo [2, 2, 1, 0<sup>26</sup>] heptane (No. 13), Transgeranyl acetone(No. 18), 4, 8 -Dimethyl- 1, 7 -nonadiene (No. 28), 2-Bromooctadecanal (No. 36)등의 성분들이 현저한 정량적인 차이를 보여주었다.

앞으로 본연구에서 확인된 정유성분들과 그 성분들중 품종간 현저한 정량적 차이를 보여주는 성분들의 잎담배 향기와의 관련성이 보다 다각적으로 연구되어져야 할것이다.

## 결 론

SDA로 국내산 향격미종 잎담배인 향초와 소향의 정유성분을 분리하고 GC/MS 및 data system으로 각 성분들을 분석하여 다음과 같은 결과를 얻었다.

1. 향초, 소향의 품종간 정성적인 차이는 거의 발견할수 없었으며 또한 orient종인 Turkish Izmir와도 정성적으로는 거의 상이점이 없었다.
2. 확인된 42개 성분들은 대부분 aliphatic hydrocarbon 및 그 유도체, terpene계 화합물, heterocyclic 화합물등 이었다.
3. 확인된 성분중 향초, 소향간에는 N-Tert-butyl-3-methoxybenzamide, 1, 7, 7-Trimethyltricyclo [2, 2, 1, 0<sup>26</sup>]heptane, Transgeranylacetone, 4, 8-Dimethyl- 1, 7 -nonadiene, 2-Bromoacetadecanal 등의 성분들이 특히 정량적인 차이가 현저하였다.

## 참 고 문 헌

1. Chuman, T. and M. Noguchi. Agric. Biol. Chem. 41 : 1021 - 1025 (1977).
2. Demole, E. and P. Enggist. Helv. Chem. Acta., 61 : 2318 - 2327 (1978).
3. Flath, R. A. and R. R. Forrey. J. Agric. Food Chem., 25 : 103 - 108 (1977).
4. Hertz, H. S., R. A. Hites and K. Biemann. Anal. Chem., 43 : 681 - 691 (1971).
5. Jennings, W. J. Chromatogr. Sci., 17 : 636 - 639 (1979).
6. Kerven, G. L. and W. Dwyer. J. Agric. Food Chem. 28 : 162 - 164 (1980).
7. Miguel, J. D., H. M. J. Richard and F. G. Sandret. J. Agric. Food Chem., 24 : 833-835 (1976).