

배초향의 정유성분조성

이종철* · 최영현* · 김영희*

Essential Oils in Aerial Parts of *Agastache rugosa* O. Kuntze.

Jong-Chul Lee*, Young-Hyun Choi*, and Young-Hoi Kim*

ABSTRACT : Contents of essential oil and its composition in aerial part of *Agastache rugosa* were investigated. Essential oil was obtained from the dried stems, leaves and flowers by steam distillation and fractionated into hydrocarbon and oxygenated hydrocarbon by silica gel column chromatography. Each isolate or fraction was identified by GC and GC-MS. The contents of essential oil were 0.29% in leaves of *Agastache rugosa* on dry basis, 0.38% in flowers. Major components were β -caryophyllene(59.3%), limonene(13.1%), δ -cadinene(10.7%) among 13 kinds of components confirmed in hydrocarbon fraction of essential oil isolated from leaves. Also, major components in oxygenated hydrocarbon fraction were methyl chavicol (79.1%) and cis-3-(1-propenyl) phenol(4.5%) among 44 kinds components confirmed. The highest content among the components identified was methyl chavicol in both leaves and flowers. On the other hand, limonene, trans-2-hexenal, 1-octen-3-one, 6, 10, 14-trimethyl pentadecane-2-one and phytol were detected typically in leaves, but jasmone and p -methoxyacetophenone were detected mainly in flowers with small quantity.

배초향(*Agastache rugosa* O. Kuntze)은 꿀풀과(Labiatae)에 속하는 多年生 草本 으로서 한국을 포함하여 일본, 중국, 만주, 동시베리아 지역 등에 분포하고 있으며 국내의 경우도 제주도를 포함하여 전국 각지에 널리 분포해 있다^{8,9)}. 배초향의 약리작용으로는 항진균 및 항나선균작용이 있는 것으로 알려져 있고⁶⁾, 한방에서는 곽향이라고 하여 성숙한 지상부를 최유, 구토, 설사, 이질, 심복통, 토역, 구취, 폐허, 위병 등에 이용하고 있다^{8,12)}. 배초향의 성분과 관련한 연구로서 flavonoid 화합물인 agastachoside, agastachin 이외에도 한등^{3,4)}은 배초향의 지하부로 부터 diterpene 및 triterpenoid 화합물들을 분리동정한 바 있다. 또한 배초향의 어린

잎은 식용으로 이용되기도 하며 지상부는 강한 향기를 지니고 있어 식품에 활용을 위한 향료자원으로서도 가치가 있을 것으로 판단된다. 한편 배초향의 정유성분에 관한 연구로서 藤田²⁾은 일본산 배초향의 지상부를 수증기 증류하여 얻어진 정유에서 주성분으로 methyl chavicol 이외에도 α -pinene, β -pinene, limonene, α -terpinene 등의 monoterpene류와 β -caryophyllene, β -humulene, β -farnesene 등 다수의 sesquiterpene 화합물을 확인한 바 있으나 다른 식물에 비교하면 정유 성분 조성에 관해서 그다지 연구되지 않은 편이며 특히 국내산 배초향의 정유성분 조성에 대해서는 거의 연구되어 있지 않은 실정이다. 따라서 본

* 한국인삼연초연구원(Korea Ginseng & Tobacco Research Institute, Taejon 305-345, Korea) <'94. 6. 24 접수>

연구에서는 국내산 약용식물자원 연구와 관련하여 배초향의 줄기, 잎, 꽃으로 부터 정유성분을 분리한 다음 성분조성을 분석한 결과 지금까지 배초향의 정유에서 밝혀지지 않은 다수의 휘발성 성분이 확인된 바 그 결과를 보고코저 한다.

재료 및 방법

1. 재료

한국인삼연초연구원 시험포에서 재배중인 배초향을 1991년 8월 경 개화기에 있는 시료를 채취하여 줄기, 잎, 꽃 부위로 구분한 다음 음건한 후 분쇄하여 분석시료로 하였다.

2. 정유성분 분리

음건시료 각 50g 에 500 ml의 증류수를 가한 다음 Schultz등¹¹⁾의 방법에 따라 개량형 simultaneous steam distillation & extraction(SDE) 장치를 사용하여 2시간 동안 추출하였다. 이때 추출용매로서는 n-pentane:diethyl ether 혼합액(1:1, v/v) 50ml를 사용하였다. 추출완료후 유기용매층만을 취하여 무수황산나트륨으로 탈수한 다음 Vigreux column(20 cm)을 사용하여 35℃ 이하에서 농축하였다. 잎으로 부터 얻어진 정유의 일부는 silica gel column chromatography에 의해 탄화수소 화합물 분획과 함산소화합물 분획으로 세분하였다. 즉 정유 100 mg을 silica gel을 충전한 column(70~230 mesh, 0.5×20 cm)에 흡착시킨 다음 n-pentane과 diethyl ether 각각 100ml 씩으로 용출시켜 탄화수소화합물 분획과 함산소화합물 분획으로 나눈 다음 감압농축하여 분석시료로 하였다.

3. 분석

Gas chromatography(GC)는 Hewlett-Packard(HP) 5880형 GC 및 5880A형 integrator를 사용하였다. Column은 Supelcowax 10 fused silica capillary column(30m×0.32mm, film thickness: 0.25um)을 사용하였고, column 온도는 50℃에서 230℃까지 분당 3℃ 씩 승온후 230℃에서 30분간 유지하였다. Injector 및 detector온도

는 250℃를 유지하였고, carrier gas는 N₂ (1.2ml/min)를 사용하여 split mode(ratio=30:1)로 주입하였다. Gas chromatography-mass spectrometry(GC-MS)는 HP 5890 GC와 HP 5970 quadropole mass selective detector(MSD)를 사용하였다. 분리관은 FFAP fused silica capillary(50m×0.20mm, film thickness: 0.25um)를 사용하였고, 분리관 온도는 50℃ 에서 5분간 유지 후 220℃까지 분당 2℃ 씩 승온하였다. 주입구 온도는 250℃, 운반기체는 헬륨(1.2ml/min), ion화 전압 70eV, interface온도는 220℃로 하였다.

분리된 각 성분의 확인은 NBS Computer Library¹⁰⁾, 문헌과의 mass spectral data^{5,7)} 및 GC에서 표준품과 머무름 시간 비교에 의해 확인하였으며, 단순히 문헌과의 mass spectral data의 비교에 의해 확인된 성분들은 잠정적으로 확인된 성분들이다.

결과 및 고찰

배초향은 민간약으로 이용되고 있을 뿐만 아니라 지상부는 특이하고 강한 향기를 지니고 있어서 식품은 물론 향료자원으로서도 활용이 기대되는 식물로 예상되며 수요증가에 대처하기 위하여는 자연산 채취가 물량의 한계, 농촌임금의 점증에 의한 채취비의 상승등으로 인공 재배가 이루어져야 할 것이다. 따라서 노지상태에서 재배된 배초향의 정유함량 및 정유성분 조성을 조사하기 위하여 당 연구원 시험포장에서 재배한 배초향을 개화기에 수확하여 지상부를 부위별로 SDE 장치를 사용하여 수증기 증류하여 얻어진 정유의 수율은 표1에서와 같이 꽃에서는 0.38%, 잎에서는 0.29%, 줄기는 0%로서 정유의 함량면에서는 잎보다는 꽃에 많이 함유되어 있었으며 줄기에는 전혀 함유되어 있지 않았다. 또한 정유구성성분의 확인을 보다 용이하

Table 1. Content of essential oil in each aerial part of plant

Part	Stem	Leaf	Flower
Content(%)	0	0.29	0.38

게 하기 위해서 앞에서 분리한 정유를 silica gel column chromatography에 의해 탄화수소 화합물 분획과 함산소화합물 분획으로 분리한다음 GC에 의한 표준품과 머무름 시간의 비교 및 문헌과의 mass spectral data의 비교에 의해서 탄화수소 화합물 분획으로 부터 확인된 성분들은 Table 2와 같다. 이 분획에서는 비교적 많이 함유된 성분으로서 monoterpene인 limonene과 sesquiterpene인 α -copaene, β -caryophyllene, δ -cadinene, β -bisabolene, α -cadinene등이 확인되었다. 특히 β -caryophyllene은 탄화수소 화합물 분획의 59.3%를 차지하고 있었는데 藤田²⁾은 일본산 배초향에서 분리한 정유를 본 실험조건에서의 유사한 방법으로 분리한 탄화수소화합물 분획에서 β -caryophyllene이 75.0%를 차지하였다고 보고하여 함량면에서 차이를 보이고 있는데 이는 재배환경의 차이 또는 육성된 품종이 아닌 혼계상태의 서로 다른 계통의 배초향을 시료로 사용했을 가능성이 있기 때문에 이에 기인된 것인지에 대한 비교 검토가 요구된다. 함산소화합물 분획에서 확인된 성분들은 Table 3과 같다. 이 분획에서는 탄화수소 화합물

Table 2. Composition of hydrocarbon fraction of essential oil isolated from *Agastache rugosa*.

Peak No.	Components	Peak area(%)	Identification
1	α -Pinene	< 0.1 ^a	A, B
2	Camphene	< 0.1	A, B
3	β -Pinene	< 0.1	A, B
4	Limonene	13.1	A, B
5	α -Phellandrene	< 0.1	A, B
6	p-Cymene	< 0.1	A, B
7	α -Copaene	3.6	A, B
8	β -Ylangene	0.7	B
9	β -Caryophyllene	59.3	A, B
10	Sesquiterpene(MW 204)	2.1	B
11	δ -Cadinene	10.7	B
12	β -Bisabolene	4.1	B
13	α -Cadinene	3.5	B

a: Less than 0.1%

A: Comparison of retention time with those of authentic samples.

B: Comparison of mass spectral data with those of authentic samples.

Table 3. Composition of oxygenated hydrocarbon fraction of essential oil isolated from *Agastache rugosa*.

Peak No.	Components	Peak area(%)	Identification
1	trans-2-Hexenal	0.3	A, B
2	3-Octanone	0.3	A, B
3	1-Octen-3-one	0.1	A, B
4	n-Hexanol	0.1	A, B
5	3-Ethyl-2-methyl-1-penten-3-ol	1.1	B
6	cis-3-Hexen-1-ol	0.2	A, B
7	3-Octanol	0.1	A, B
8	1-Octen-3-ol	1.9	A, B
9	2,4-Heptadienal	0.1	A, B
10	2,4-Heptadienal	0.1	A, B
11	Linalool	0.5	A, B
12	Linalyl acetate	< 0.1	B
13	Limonene epoxide	0.1	B
14	1-Nonen-3-ol	< 0.1	B
15	Methyl chavicol	79.1	A, B
16	Methyl salicylate	< 0.1	A, B
17	β -Darnascenone	0.3	A, B
18	Caproic acid	< 0.1	A, B
19	Geranylacetone	< 0.1	A, B
20	Carvone	< 0.1	A, B
21	Benzyl alcohol	0.2	A, B
22	β -Phenylethyl alcohol	0.1	A, B
23	Jasmone	0.1	A, B
24	β -Ionone	0.1	A, B
25	Cadina-1,4-dien-4-ol	0.1	B
26	Caryophyllene epoxide	1.2	B
27	Methyl eugenol	0.6	A, B
28	Anisaldehyde	0.1	A, B
29	Octanoic acid	< 0.1	A, B
30	6,10,14-Trimethylpentadecan-2-one	1.1	B
31	Spathulenol	0.3	B
32	p-Methoxyacetophenone	0.5	B
33	Eugenol	0.1	A, B
34	Pathouli alcohol	0.2	B
35	p-Methoxypropiofenone	< 0.1	B
36	T-Muurolol	0.3	B
37	(E)-3-(1-Propenyl) phenol	4.5	B
38	Dihydroactinidiolide	0.2	A, B
39	Methyloleate	< 0.1	B
40	3-Heptadecen-5-yne	0.2	B
41	Indole	< 0.1	A, B
42	Dibutylphthalate	0.2	A, B
43	Phytol	0.7	A, B
44	Linoleic acid	1.6	B

분획에서 보다 많은 성분들이 검출되었는데 확인된 성분들 중 양적으로 많이 검출된 성분은 methyl chavicol로서 합산소화합물 분획에서 79.1%를 차지하였으며, 이외에도 1-octen-3-ol, caryophyllene epoxide, 6, 10, 14-trimethyl pentadecan-2-one과 GC-MS에 의해서 잠정적으로 확인된 3-ethyl-2-methyl-1-penten-3-ol과 cis-3-(1-propenyl) phenol등도 합산소화합물 분획중에서 1% 이상을 점하고 있었다. 특히 양적으로 많이 함유되어 있는 methyl chavicol은 식품용 및 향장품용 향료로 널리 사용되고 있으며¹¹⁾ 유사한 구조를 지닌 anethole에 비해 한약취(sweet-herbaceous)와 유사한 강한 향기를 지니고 있기 때문에¹¹⁾ 배초향 특유의 향기발현에 중요한 역할을 할 것으로 판단된다. 또한 β -damascenone, β -ionone, dihydroactinidiolide와 GC-MS에 의해서 잠정적으로 확인된 edulan등은 강한 꽃향기를 내는 대표적인

성분들로서 배초향의 정유에서는 본 실험에서 처음으로 확인되었다.

한편 배초향의 잎과 꽃으로 부터 분리한 정유를 분석 비교한 gas chromatogram은 Fig. 1과 같고 확인된 성분조성을 비교한 결과는 Table 4와 같다. 2종의 정유에서 확인된 60여종의 성분들 중 양적으로 가장 많이 함유된 성분은 methyl chavicol로서 잎에서 얻어진 정유에서 64.5%를 차지하였고 꽃에서는 78.4%로서 잎에서보다 비율이 높은 경향이었으며 잎의 경우 일본산 배초향의 정유에서 methyl chavicol이 93.6%로 보고되어 있는 것 보다는 낮은 경향을 보였는데 이는 앞에서 언급한 바와 같이 재배환경의 차이 또는 재배 계통의 차이에 기인된 것으로 생각된다. Limonene을 포함한 monoterpene 화합물들은 주로 잎에서만 검출되었으며 β -caryophyllene, α -humulene과 같은 sesquiterpene 화합물 역시 잎에서 많이 검

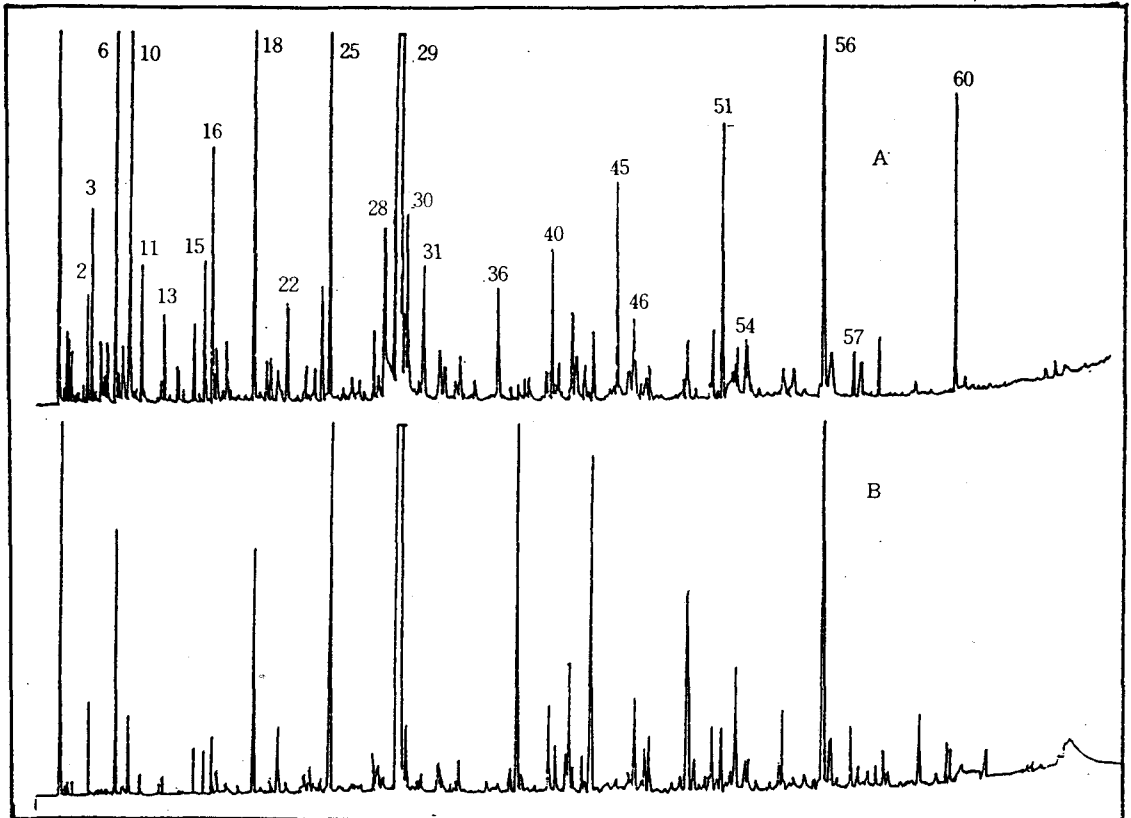


Fig. 1. Gas chromatograms of essential oils isolated from leaves(A) and flowers(B) of *Agastache rugosa*.

Table 4. Composition of essential oil isolated from leaves or flowers of *Agastache rugosa*.

Peak no	RT (min)	Components	Peak area(%)	
			Leaves	Flowers
1	3.76	α -Pinene	< 0.1	-
2	4.07	Camphene	0.2	0.1
3	4.38	β -Pinene	0.3	-
4	5.08	Myrcene	0.1	-
5	5.56	α -Terpinene	0.1	-
6	6.18	Limonene	1.7	0.5
7	6.41	β -Phellandrene	< 0.1	-
8	6.79	α -Phellandrene	0.2	-
9	7.19	γ -Terpinene	< 0.1	0.2
10	7.28	trans-2-Hexenal	2.4	-
11	8.20	3-Octanone	0.4	< 0.1
12	8.40	p-Cymene	< 0.1	-
13	9.98	1-Octen-3-one	0.2	< 0.1
14	12.34	n-Hexanol	0.2	0.1
15	13.16	3-Ethyl-2-methyl-1-penten-3-ol	0.5	0.1
16	13.77	cis-3-Hexen-1-ol	0.8	0.2
17	14.18	3-Octanol	0.2	0.1
18	17.02	1-Octen-3-ol	1.9	0.8
19	17.97	2,4-Heptadienal	0.1	-
20	18.28	α -Copaene	0.2	< 0.1
21	18.86	2,4-Heptadienal	< 0.1	0.3
22	19.51	Linalool	0.4	< 0.1
23	20.92	β -Ylangene	0.1	< 0.1
24	22.26	Linalyl acetate	0.4	< 0.1
25	22.93	β -Caryophyllene	2.7	1.9
26	24.70	Limonene epoxide	0.1	-
27	26.50	α -Humulene	0.3	0.2
28	27.30	Valeric acid	0.9	-
29	28.64	Methyl chavicol	64.4	78.4
30	29.08	Sesquiterpene(MW 204)	0.7	0.3
31	30.31	δ -Cadinene	0.6	0.1
32	31.56	β -Bisabolene	0.3	0.2
33	32.86	β -Sesquiphellandrene	0.1	-
34	33.12	Methyl salicylate	0.2	0.1
35	34.28	n-Octadecane	0.1	-
36	36.06	β -Damascenone	0.5	-
37	37.74	Caproic acid	0.1	-
38	38.16	Geranylacetone	0.1	< 0.1
39	38.54	Carvone	< 0.1	-
40	40.30	Benzyl alcohol	0.6	0.3
41	41.92	2-Phenylethyl alcohol	0.4	0.4
42	43.58	Jasmone	0.3	1.5
43	42.28	β -Ionone	0.2	0.1
44	45.24	Cadina-1,4-dien-4-ol	< 0.1	-
45	45.56	Caryophyllene epoxide	0.9	0.1
46	46.92	Methyl eugenol	0.3	0.3
47	47.85	Anisaldehyde	0.1	0.2

48	48.26	Octanoic acid	0.1	0.2
49	50.78	o-Methoxy acetophenone	0.1	< 0.1
50	51.27	Egulan	0.3	0.6
51	54.12	6,10,14-Trimethylpentadecan-2-one	1.1	0.3
52	53.34	Spathulenol	0.4	0.3
53	55.34	p-Methoxyacetophenone	0.2	0.6
54	55.92	Eugenol	0.2	0.1
55	59.65	p-Methoxypropiophenone	0.1	-
56	61.96	(E)-3-(1-Propenyl)phenol	7.7	4.4
57	64.23	Dihydroactinidiolide	0.2	0.2
58	69.13	Dibutylphthalate ^b	< 0.1	0.3
59	71.69	Methoxycinnamaldehyde	-	0.2
60	72.21	Phytol	1.4	0.2

a: Not detected

b: contaminated from container

출되는 경향을 보였다. 또한 꽃에서 보다는 잎에서 많이 검출된 성분들로서는 신선한 식물체 특유의 꽃냄새와 밀접한 관련이 있는 trans-2-hexenal, n-hexanol, cis-3-hexen-1-ol, 1-octen-3-ol 등 저분자의 aliphatic alcohol 이외에도 식물체를 건조하는 과정에서 chlorophyll의 분해에 의해 생성되는 것으로 알려진 6,10,14-trimethylpentadecan-2-one, phytol 역시 잎에서 많이 검출되었다. 반면에 2,4-heptadienal, cis-jasmone, p-methoxyacetophenone 등은 양적으로는 미량이지만 잎보다는 꽃에서 함유비율이 높은 경향을 보였다.

적 요

배초향의 지상부로 부터 수증기 증류법에 의해 정유성분을 분리한 다음 silica gel column chromatography에 의해 탄화수소화합물 분획과 함산소화합물 분획으로 나눈후 GC 및 GC-MS에 의해 각 분획의 성분조성을 분석한 결과는 다음과 같다.

1. 배초향의 정유함량은 건물중량으로 잎에서는 0.29%, 꽃에서는 0.38%였으나 줄기에서는 전혀 검출되지 않았다.
2. 잎의 정유에서 분리한 탄화수소화합물 분획에서 확인된 13종의 성분중 주성분은 β -caryophyllene(59.3%), limonene(13.1%), δ -ca-

dinene (10.7%) 이었고, 합산소화합물 분석에서 확인된 44종의 성분중 주성분은 methylchavicol(79.1%), cis-3-(1-propenyl)phenol (4.5%) 등이었다.

3. 잎과 꽃의 정유성분 조성에서 양적으로 가장 많이 함유된 성분은 methylchavicol 이었고, limonene, trans-2-hexenal, 1-octen-3-one, 6,10, 14-trimethylpentadecan-2-one 및 phytol등은 잎에서 특징적으로 검출된 반면 jasmone 및 p-methoxyacetophenone등은 양적으로 미량이지만 꽃에서 많이 검출되었다.

인용문헌

1. Arctander, S., 1969, Perfume and Flavor Chemicals, Vol. II, Montclair, N. J., 1131
2. 藤田安二, 藤田眞一. 1965, 日本化學雜誌, 86:635
3. 한대석. 1987. 배초향 지하부의 triterpenoid 성분, 생약학회지, 18(1):50~53
4. 한대석, 김영중, 김세은, 주혜수, 변순정. 1987. 배초향지하부의 diterpene 성분에 관한 연구, 생약학회지, 18(2):99~102
5. Heller, S. R. and G. W. A. Milne. 1980. EPA/NIH Mass spectral data base. U. S. Department of Commerce. Washington, DC.
6. Itokawa, H., K. Suto and K. Takeya, 1981. Structures of isogatachoside and agastachin, new glycosylflavones isolated from *Agastache rugosa*, Chem. Pharm. Bull., 29(6):1777~1779
7. Jenning, W. and T. Shibamoto. 1980. Qualitative analysis of flavor and fragrance volatiles by glass capillary gas chromatography. Academic Press. New York.
8. 鄭普燮, 辛民教. 1990. 圖解鄉藥(生藥)大事典(植物篇). 永林社:839
9. 鄭台鉉. 1972. 韓國植物圖鑑. 教育社. 上卷:536
10. McLafferty, F. W. and D. B. Stauffer. 1988. NBS Registry of Mass Spectral data. New York.
11. Schultz, T. H., R. A. Flath, T. R. Mon, S. B. Enggling and R. Teranishi. 1977. Isolation of volatile components from a model system. J. Agric. Food Chem. 25:446~461
12. 伸載鏞, 裴秉哲. 1988. 方藥合編解說. 成輔社:546