

잎담배와 담배연기의 화학성분

양 광 규

한국인삼연초연구소 화학부 제 1 연구실

본 총설은 담배연기의 각 성분에 따른 전반적인 반응기작은 물론 잎담배의 전구물질에 의한 연기 성분의 생성기작을 다루었다. 따라서 전체적으로 다루어질 내용은 Alkanes, Alkenes, Alkynes, Aromatic hydrocarbons, Sterols, Oxygenated isoprenoids compounds, 그리고 Alcohols, Esters, Aldehydes, Ketones, Quinones, Nitriles, Cyclic ethers, Acids, Phenols, Phenolic ethers, 그밖에 Alkaloids, Amino acids, Brown pigments, Protein 등으로 구분하였으며 Stedman R. L. 이 담배 관련화합물에 대하여 기술한 총설 (Chemical Review vol. 68 P153~207, 1967)을 주요 참고 문헌으로 하였다. 그러므로 여기에 소개하는 내용은 Stedman의 총설을 번역하였다해도 과언이 아니며 지면상 먼저 Alkanes~Oxygenated Isoprenoid compounds를 소개하고자한다.

서 론

엽연초는 연초잎을 건조하고 다시 후숙하여 완성된 것이기 때문에 그 전체가 유기화합물로 이루어져 있다. 하여도 과언이 아니다. 그러면 엽연초의 품질에 관계있는 요소 즉 향각미 연소성 선택을 위시하여 팽윤성 연량, 회색등 어느 것이나 엽연초의 화학 성분의 종류와 함유율과 그 조합에 관계되지 않은 것이 없다. 그러므로 세계 여러 학자들의 잎담배 품질과 화학 성분과의 관계를 규명하고자 노력하여 왔다. Smuck와 같은 학자는 가용성 탄수화물을 분자로 표시하고 단백질 물질을 분모로 표시하여 이 값이 크면 품질이 양호한 것으로 주장하였으며 특히 향각미 종인 Orient 엽과 직접 관계가 있

다고 하였다. 이와같이 Smuck는 가용성 탄수화물을 담배맛에 좋은 영향을 주고 단백질 물질을 나쁜 영향을 주는 잎담배 성분임을 알수 있다.

Pyrik 씨도 환원성 물질과 수지 또는 납질을 분자로 하고 분모는 니코틴, 단백질, 암모니아, 기타 질소화합물 회분을 취하여 분자는 향각미 양화물질, 분모는 향각미 열화물질을 나타내는 것으로 이 식에 의하여 계산된 값이 크면 품질이 양호한 것으로 표시한 것으로, 보다 환원성물질과 수지물질이 담배 껍미에 좋은 영향을 나타냄을 알수 있다. Kovalenco는 Shmuck 계수 중에서 단백질을 전질소로 대체하여 Kovalenco 계수라 하고 이 값이 크면 품질이 양호함을 주장하였다. Shmuck의 또다른

방법으로 Polyphenol 을 전 환원당으로 나누어 Polyphenol 수라 하고 이수치가 적을수록 품질이 좋다고 한 점을 보면 Polyphenol 도 담배맛에 좋지않은 영향을 주고 있음을 알수 있다. 그러나 Pyriki 등에 의하면 Shmuck 계수와 Pyriki 계수는 양절담배에서는 그 값을 적용하여도 적합하나 Polyphenol 수는 대법의 표시로서만 적용 될 뿐이라고 주장한 점을 간과해서는 안 될것같다. Philips 는 수산과구연산을 분모로 하고 환원당(글루코오스로서) 을 분자로 하여 나눈값이 크면 품질이 양호함을 주장하여 수산과 구연산을 품질지해 요인으로 평가하였다. Brückner 는 잎담배의 내용성분을 힘의 요소(전질소+단백배질소+니코틴), 방향요소(폴리페놀+수지), 유화요소, 자극요소로 분리하여 품질에 양호한 성분과 저해성분을 구분하여 그 비로서 담배 품질을 평가하였다.

Coulson 은 당과 니코틴의 비로서 그 값이 높은 것은 비교적 완화된 담배라 하였고 잎담배 중 석유 ether 추출물의 양에 따라 flavor 의 다소를 알수 있다고 하였다. 여러가지 내용성분들이 flavor 와 aroma 에 직접 관계가 있다고 주장하는 학자들이 많은데 aldehyde 와 Ketone 화합물질이 이들 향기 물질이 주성분이며 Weybrew와 Stephens 는 acetone 과 2-butanone 이 잎담배의 품질 성숙도 그리고 Curing 과정중에 생성되는 휘발성 Carbonyl 과 직접 관계가 있다고 보고하고 있다. TSO의 보고에 의하면 전통적인 품질평가는 물론 연소인자로서 Potassium 과 nitrate 를, 방향성 인자로서 석유 에틸 추출물, Wax, lipidresidue 등을 추가시켜 평가하였는데 특히 발암 물질과 직접 관계가 있는 성분을 저해요인으로 보았다. 이들을 대략 종합해 보면 담배 품질에 양호한 요소로는 환원당, 수지, 또는 납질등이며 저해 성분으로는 담배태물질, 암모니아, Polyphenol , 기타 질소화합물, 수산, 구연산, 등을 들수 있다. 그리고 잎담배 성분을 Alkanes, Alkenes 과 Alkynes, Aromatic hydrocarbon Sterols 과 Oxygenated Isoprenid화합

물, Alcohols 과 Ethers, Aldehydes, Ketones 그리고 Quinones, Nitriles, Cyclic Ethers, 그리고 유황화합물, 염, Phenols 과 Phenolic Ethers, Alkaloids 와 Bases, Brown Pigments, Carbohydrates, Amino Acids, Protein, 그리고 관련 화합물, 기타 화합물 등으로 나누어 기술 코저한다.

2. 잎담배 성분

가. Alkanes

어디에나 있는 normal 과 iso 파라핀이외도 담배잎은 Anteiso (3-methyl) 동족체 (Homologs) 를 포함하여 상당량의 다른 갈래 연쇄인 Alkane 을 포함하고 있다. 분자체 (molecular Sieve) 와 같이 담배잎 왁스의 파라핀 왁스와 처리하면 normal 과 Branched 이성질체를 얻을 수 있다. 분리된 iso 와 anteiso 화합물은 mass spectral fragmentation 에서의 차이로써 구별된다. 주 이성질체는 C₂-C₈ 결합에서 절단이 잘되어 iso 와 anteiso 이성질체에 대하여 P-43과 P-29에서 각각 주peak 가 나타난다. 이 차이는 gas chromatography data 와 연결 확인과 이성질체의 수준을 정량적으로 결정 할수 있다.

이와같은 방법으로 담배잎 paraffinic 분석을 하면 Branched chain 화합물은 껀련에서 24~45%구성되며 iso 와 anteiso 화합물 거의가 동량으로 구성되어 있다. normal 파 iso 에서는 홀수 동족체가 많고 C₁₁ 화합물이 가장 많이 존재한다. anteiso 에서는 우수 화합물만이 발견되며 C₁₂ 탄화수소가 많다.

담배잎에서 주된 파라핀계 화합물은 C₁₁-C₁₆ 화합물이지만 C₈-C₁₀ 범위의 normal 과 iso 동족체가 소량 존재한다. 또한 Turkey 잎담배의 vapor headspace 는 pentane, hexane, heptane 이 존재할 가능성을 나타내고 있다. Infrared 와 mass spectra data 에 분자량이 500-1900을 갖은 환상화합물이 나타난다. 일반적으로 그들은 석유 naphthenes 을 닮았다.

결련 연기중 비교적 낮은 분자량의 탄화 수소는 가스상으로 존재하며 gas chromatography와 mass spectrometry로 쉽게 분리된다. 연중 Cycloalkanes은 cyclopentane, methyl cyclopentanes, Cyclohexane 등이다. C₁₂에서 C₃₃까지는 갈래연쇄 지방족 파라핀과 C₆골격은 연중에서 일어난다. 잎담배에있는 Paraffins은 담배 타입에 따라 좀 다르며 잎담배 품질과는 관계가 없다. 성분들의 불활성 성질로부터 추측되는 것과 같이 담배 발효 중에는 paraffins에는 변화가 없다. 결련 연중 C₁₂ ~ C₃₃ paraffins량은 결련당 약 0.5~1.4mg이며 갈래 사슬 성분의 혼합물중 9~18%이다. 연중 Paraffin 탄화수소는 연중에서 다핵 방향족 탄화수소 (Polynuclear aromatic hydrocarbon)으로 추정되어 왔다. 탄소수가 많은 Alkanes은 동물에서 benzo (a) pyrene의 중앙 발생효과를 저지하는 효과를 나타낸다.

Table 1. Alkanes in tobacco leaf and smoke

	Leaf		Smoke	
	Carbon no.	Carbon no.	Carbon no.	Carbon no.
Normal	S-35	0	1-0, 12-36	0
Iso	27-34	0	4-6, 27-33	0
Anteiso	2S, 30, 32, 34	0	6	0
Cyclic	5, 6	0

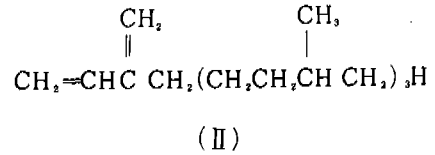
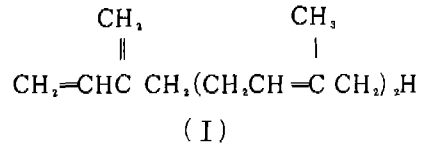
※ 0 : 잎 또는 연중에서 확인된 물질
 ... : 잎 또는 연중에서 미확인된 물질

나. Alkeness Alkyness s

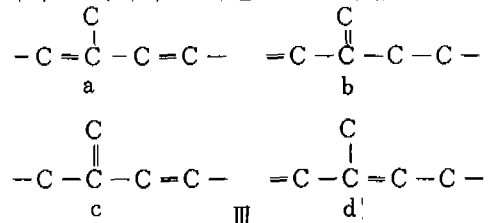
1) Isoprenoid 탄화수소

잎담배와 연중에서 Sesquiterpene farnesene (I)과 diterpene neophytadiene (II)의 존재가 입증되었다. 연중 Farnesene은 잎에

있는 Solanesol, neophytadiene 혹은 확인되지 않은 C₁₈ isoprenoid 알콜의 열분해로 일어날수 있다.

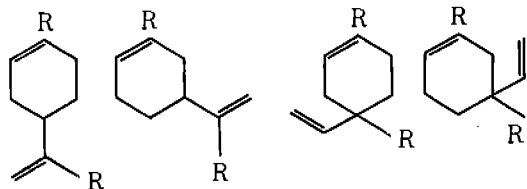


Farnesiferol은 (I)의 잎담배내 전구물질로 추정되나 담배에서 이들 화합물이 생성된다는 증거는 없다. 미국 결련 연기는 다른 끝과 안쪽에 짝 이중결합이 있는 neophytadiene 이성질체 네개를 포함하고 있다. 주어진 isoprene 단위나 인접한 단위 사이에 (III a-d)와 같이 적어도 네개의 올레핀결합이 복합되어 있다.



이들 Phytadienes의 12개는 연중에서 neophytadiene과 기하학적 이성질체를 생성할수 있다. 1, 2, 4-trialkyl-1, 3-butadiene도 존재할수 있다.

alkylanthraquinones은 유사한 Carboxylic산으로 산화된다. 그러므로 이들 산과 methyl 유도체들은 혼합물 용점결정과 적외선 spectrum분석으로 확인된다. artifact가있는 이성질체의 가능성은 무시되며 이점에 대한 몇개의 실험적 증명이 되었다. 연중에 neophytadiene에 관한 다른 Hydrocarbon들은 norphytene (2, 6, 10, 14-tetramethyl-1-pentadecene)과 neophytadiene이 합체 (IV, R=4, 8, 12 trimethyltridecyl)의 혼합물이다.



IV

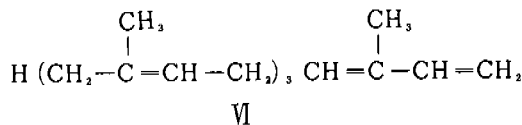
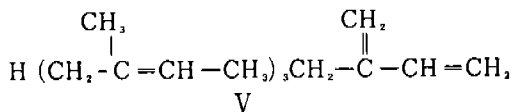
이들 이합체들은 neophytadiene이 190~200℃에서 가열될때 주 생성물과 똑 같으며 켈런 연기 추출의 시험조작으로 부터 생기는 것으로는 생각되지 않는다. 영국 켈런에서 neophytadiene 이 연기의 acyclic phyladienes 99% 이상을 포함하고 있음을 발견한 바있다. N - eophytadiene 이성질체는 분획의 나머지에 존재하나 확실한 증거는 발표되지 않았다.

미국 담배에서 III a-d반인 neophytadiene의 존재를 기술하는 위 연구에서 정량적인 양은 제시하지 못하였다. 그러므로 두 조사 연구를 비교 할수 없었다. 그러나 이들 이성질체의 생산량이 위에서 보다 1%를 훨씬 넘는다. 약간의 불일치는 켈런에서 조성차이로 생각된다.

Phytadiene C가 이성질체의 혼합물이므로 열연초에 존재한다는 주장은 의심스럽다. 대신 III a에 유사한 1/2인 artifact는 산 세척 알루미나상에서 neophytadiene의 이성질체화로 분리될수 있을지 모른다. 이 흡수체는 Chromatographic 분리하는동안 Squalene neophytadiene 그리고 아마도 다른 terpene.들을 이성질체화 할것이다. 열연초에 있는 neophytadiene에 대한 분석방법 개발되었다. 여러 다른 담배 Type에서 Terpene의 수준은 다르게 나타나나 잎담배 품질과는 상관없다. 생물학적으로 생쥐 상피에 적용했을때 Phytadiene 들은 비후를 생성치 않고 지방선 파괴를 일으키지 않는다.

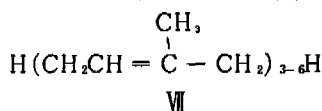
연기내에 Triterpene squalene의 존재는 확립되었고 잎담배에서 산출도 인용되었다. 연중에서 isosqualene의 존재는 분리에 사용된 산

세척 alumina로 squalene의 이성질체화로 불수 있다. 그러나 다른 연구들은 산 세척 Alumina가 분리에 적용되지 않았다면 연중에서 다른 이성질체 squalene 분리 하였거나 재생된 Squalene을 분리하였다 기술하고 있다. 잎담배의 Tetraterpenoid hydrocarbon은 숙성된 Burley 담배연구에서 분리된 잘 알려진 무색의 Polyenes와 Carotenoid Pigment를 포함하고 있다. Table II에 표시한외에 부분적으로 확인된 불포화hydrocarbon들이 분리되었으며 한 화합물은 isodemethylaxerophthene과 유사하고 다른 두 성분은 lycopene 과 비슷하다. 연중에서 Solanesene은 구조적으로 Solanesol과 관계된 trisesguiterpene들의 혼합물이고 Solanesol의 탈수반응으로 또는 그의 Acetate의 열분해로 형성된다. 담배연기에서 Solanesene 혼합물의 주성분은 V와 VI이다.



Solanesene과 dihydrosolanesene의 오존화 반응의 정량적인 연구와 V와VI의 기초적인 구조를 확립하였다. V에대한 확증적인 증거는 Phytadienes와 같은 방법으로 anthraquinone-2-carboxylic acid로 산화된 alkylanthraquinone을 생산하면서 1,4-naphthoquinone과 같이 분리된 혼합물의 Diels-Alder 반응으로 얻어진다. 그러나 VI anthraquinone-1,2-dicarboxylic acid로부터 기대 생성물의 존재는 VI가 비교적 불활성이어서 반응 혼합물에서 증명할수 없었다. 반응성의 비슷한 패턴은 Diels-Alder반응에서 Phytadienes(III a-d)과 이미 관찰되었다. Alumina로부터 연속적으로 분리한 결과는 neophytadiene이성질체, neophytadiene, 이

성질적인 squalenes, 그리고 solanesenes이다. Table II에든 isoprenoid polyolefins들은 아마도 solanesol과 같은 이성분의 열분해로 형성된 연기에서 발견되는 화합물의 (VII) 시리즈이다.



이들 olefin들은 모두 trans배치 (All-trans configuration)이고 꺾련당 약 2 ~ 5 μg 수준으로 생긴다. 상치되는 보고도 연중에서 acyclic

monoterpene, alloocimene 의 존재 관련하여 나타나고 있다. Terpene은 보발암성을 갖는 연기성분으로 주장되었고 연기 응축물에서 비교적 많은량(0.5%)이 발생되었다. 이들 발견들은 모든 응축물에 존재한다면 alloocimene은 0.006%이하 수준을 나타내어 후의 보고에서 논쟁이 되었다. 담배 연중에 α -pinene과 myrcene 의 존재의 징조가 있었으나 상세한 분리 확인은 보고되지 않았다.

Table II

ALKENES AND ALKYNES IN TOBACCO LEAF AND SMOKE

Hydrocarbon	Leaf	Smoke	Hydrocarbon	Leaf	Smoke
	Isoprenoid		2-Butene	...	o
α -Carotene	o	...	3-Buten-1-yne	...	o
β -Carotene	o	...	1-Butyne	...	o
2,4-Dimethyl-4-vinylecyclohexene	...	o	Cyclohexene	...	o
Dipentene	...	o	1,3-Cyclopentadiene	...	o
Farnesene	...	o	Cyclopentene	...	o
Isomeric squalenes	...	o	1-Decene	...	o
Isoprene	...	o	2,3-Dimethyl-1-butene	...	o
Isoprenoid polyolefins	...	o	3,3-Dimethyl-1-butene	...	o
1-Methyl-4-isopropyl-1-cyclohexene	...	o	Ethylene	...	o
Neo- β -carotene	o	o	1-Hexene	...	o
Neophytadiene	o	o	2-Hexene	...	o
Neophytadiene dimers	...	o	Methylacetylene	...	o
Norphytene	...	o	2-Methyl-1-butene	...	o
Phytadienes	...	o	2-Methyl-2-butene	...	o
Phytoene	o	o	3-Methyl-1-butene	...	o
Phytofluene	o	o	1-Methyl-1-cyclopentene	...	o
β -Pinene	...	o	3-Methyl-1-cyclopentene	...	o
Solanesenes	...	o	4-Methyl-1-cyclopentene	...	o
Squalene	...	o	2-Methyl-1-pentene	...	o
	Others		2-Methyl-2-pentene	...	o
Acetylene	...	o	3-Methyl-1-pentene	...	o
Allene	...	o	4-Methyl-1-pentene	...	o
1,2-Butadiene	...	o	4-Methyl-2-pentene	...	o
1,3-Butadiene	...	o	2-Methylpropene	...	o
1-Butene	...	o	Monolefins (C ₁₀ -C ₂₀)	...	o
			1,2-Pentadiene	...	o
			1,3-Pentadiene	...	o
			1,4-Pentadiene	...	o
			1-Pentene	...	o
			2-Pentene	...	o
			Propene	...	o

※ o : 잎 또는 연중에서 확인된 물질

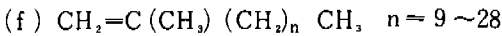
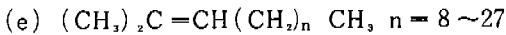
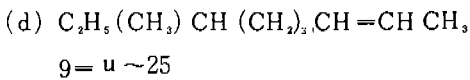
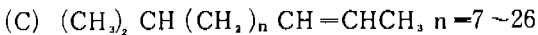
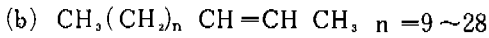
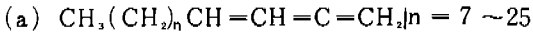
... : 잎 또는 연중에서 확인된 물질

2) 기타 Alkenes와 Alkynes

저분자량 Alkene와 Alkynes는 단독이 아니라면 연기의 기체상에서 일어난다. 이구룹에서 알려진 성분 목록은 1959년 이래 꽤 많이 생겼다. 새로이 발표된 많은 성분들은 GC와 Mass spectrometric 분석으로 분리 확인 되었다. 담

배 연기중에 기체상 성분이 중요한 생리학적 활성을 (예를 들면 섬모 정지) 보여준다 할지라도 가벼운 hydrocarbon 들은 낮은 용량에서 비교적 비독성으로 믿어진다. Table II 에든 C₁₀ ~ C₂₂ monoolefin 들은 질산은을 포함하는 silic Acid 에서 박층크로마토그래피를 포함하

는 여러과정으로 연기로부터 분리한 ethyle-
ric hydrocarbon 시리즈이다. 여섯개의 동족계
열화합물(VIII)은 가능한 Cis 와 trans 이성질체
를 모두 포함하여 발견되었다. 구조는 olefin
들의 산화로 얻어지는 산들의 hydrogenation 과
methylester alkane 확인하여 결정되었다.



VIII

Olefin 의 총생산량은 결련1000분당 약 3 mg이있
으며 화합물은 연연초에는 존재하지 않는다.

다. 방향족 탄화수소

benzene, toluene, 이성질 xylene 그리고 몇
개의 여러고리 탄화수소의 가능성을 제외하고
는 이급의 화합물들은 담배 연기에서만 발견된
다. benzo[a]pyrene [BAP] 과 옆에있는 관
련PAH미량은[자랄때 대기오염에서 연유되거나
조리나 공업적인 과정에서 스티프이나 공기에서
오염된데서 연유된다. 보통의 Chromatogra-
phic 그리고 spectrometric 방법에 더하여
1, 3, 5- trinitrobenzene 의 침전은 고전적 방법
에 의하여 뒤에 확인된 저분자량 방향족 탄화
수소의 농축물을 얻는데 사용되어 왔다. 그러
므로 benzene, naphthalene, 그리고 alkye유도
체수준은 결련당 0.17부터 46ug 으로 변한다.
이들 화합물의 많은 것들이 발암성인 고로 담
배연기의 PAH에 많은 관심을 보여왔다. 세개
혹은 그 이상환을 갖는 PAH 60개이상 화합물
이 분리되었다. 그리고 여기에는 헥테로 고리
다핵 방향족 화합물과 구조가 결정되지 않은
PAH알칼 유도체는 포함하지 않은 것이다. 연

기중에서 PAH의 분리 확인 생물학상의 중요
성은 여러곳에서 발표되었고 현재의 토의는 어
느정도 유난한 점에 한정될 것이고 그리고 보
충되는 정보는 한정될 것이다. 생물 학적으로
중요한 주탄화수소는 약 1~2 ppm수준의 연기
응축물에서 생기는 BAP이다. 다른 생물학적
으로 활성인 PAH는 Chrysene 의 가능성을
제외하면 일반적으로 저농도 존재한다. 연중
에서 이들 화합물의 극소량을 확인 분리하기 위
하여는 Paper, 박층 그리고 가스크로마토그라
피, 형광spectrometry 가 필요하다. electron
capture detection (전자 포획 검출)을 가진
capillary column 의 이용은 연중에있는 이들
화합물의 확인과 정량에 도움이 되어왔다. 이
성질체 Benzopyrene 들의 분리는 Capillary c-
column 과 lithium chloride 를 포함하는 더 큰
직경의 gas solid chsomatography 로 달성되었
다. PAH는 caffeine 과 1, 3, 7, 9 tetrameth-
yluric acid (TMU)와 같은 nitro aromatic 화
합물과 Purine 과 착물을 형성한다. TMU는
cyclohexane 과 90%methanol 사이에 역류분
포를 비교적 대규모로 PAH의 착혼합물을 분
활하는데 사용되거나 착염제와 적용된 전압의
높은 극성용액으로 silicic 산으로부터 제거하여
PAH의 농축물을 얻을수 있다. 소규모 분리는
착염제와 같은 극성용액을 사용하여 Paper전
기영동법으로 달성할수 있다. 담배연기에서
적은PAH는 결정적확인에 여러가지 이유때분
에 곤란하다. 분리된 물질의 소량은 특히 박층
plate 상에서 쉘사리 빛에의해 분해된다. 아주
가까운 유사체가 없고 Back ground 가 spec-
tral 흡수가 없는 단일 PAH분리는 완전하게
얻기 곤란하다. 분리된 양은 때때로 형광방법
으로 spectral 분석이 요하며 이 방법은 PAH
에 대하여는 높은 흡수를 갖이나 적외선 측정
보다 더적은 고유성을 나타낼지 모른다. 많은
보고에서 PAH의 확인은 의심스럽지 않으면
잠정적인 것으로 생각해야 한다. 표에 나타낸
화합물에 더하여 여러 다른 PAH의 존재 가능
성은 Picene, benzo[a]fluoranthene dib-

〈Table III〉
AROMATIC HYDROCARBONS IN TOBACCO SMOKE

Compound	Compound
Acenaphthene	0
Acenaphthylene	0
Alkylbenzo[a]pyrene	0
Alkylchrysene	0
Alkylfluoranthene	0
Alkylpyrene	0
Anthanthrene	0
Anthracene	0
Azulene	0
Benz[a]anthracene	0
Benzene	0
Benzo[b]fluoranthene	0
Benzo[g,h,i]fluoranthene	0
Benzo[j]fluoranthene	0
Benzo[k]fluoranthene	0
Benzo[m,n,o]fluoranthene	0
5H-Benzo[a]fluorene	0
11H-Benzo[a]fluorene	0
Benzo[b]fluorene	0
7H-Benzo[c]fluorene	0
11H-Benzo[b]fluorene	0
Benzo[a]naphthacene	0
Benzo[g,h,i]perylene	0
Benzo[c]phenanthrene	0
Benzo[a]pyrene	0
Benzo[e]pyrene	0
Biphenyl	0
Chrysene	0
Coronene	0
Dibenz[a,h]anthracene	0
Dibenzo[a,i]fluorene	0
Dibenzo[a,c]naphthacene	0
Dibenzo[a,j]naphthacene	0
Dibenzo[b,h]phenanthrene	0
Dibenzo[a,k]pyrene	0
Dibenzo[a,i]pyrene	0
Dibenzo[a,l]pyrene	0
Dibenzo[cd,jk]pyrene	0
9,10-Dihydroanthracene	0
5,6-Dihydro-8H-benzo[a]cyclopent[h]-anthracene	0
10,11-Dihydro-9H-benzo[a]cyclopent- [i]anthracene	0
3,4-Dihydrobenzo[a]pyrene	0
16,17-Dihydro-15H-cyclopent[a]-phenanthrene	0
9,10-Dimethylbenz[a]anthracene	0
Dimethylchrysene	0
Dimethylfluoranthene	0
1,6-Dimethylnaphthalene	0
1,8-Dimethylnaphthalene	0
2,6-Dimethylnaphthalene	0
2,7-Dimethylnaphthalene	0
2,5-Dimethylphenanthrene	0
Ethylbenzene	0
Ethyltoluenes (o-, m-, p-)	0
Fluoranthene	0
Fluorene	0
Indene	0
Indeno[1,2,3-cd]fluoranthene	0
Indeno[1,2,3-cd]pyrene	0
Ionene	0
4-Isopropenyltoluene	0
Isopropylbenzene	0
4-Isopropyltoluene	0
2-Methylanthracene	0
9-Methylanthracene	0
3-Methylbenz[a]anthracene	0
5-Methylbenz[a]anthracene	0
11-Methyl-11H-benzo[a]fluorene	0
Methylbenzo[a]pyrene	0
Methylchrysene	0
8-Methylfluoranthene	0
1-Methylfluorene	0
9-Methylfluorene	0
1-Methylnaphthalene	0
2-Methylnaphthalene	0
1-Methylphenanthrene	0
9-Methylphenanthrene	0
1-Methylpyrene	0
2-Methylpyrene	0
4-Methylpyrene	0
Methylstyrenes (o-, m-)	0
Naphthacene	0
Naphthalene	0
11H-Naphtho[2,1-a]fluorene	0
Naphtho[2,3-a]pyrene	0
Perylene	0
Phenanthrene	0
Phenylacetylene	0
Pyrene	0
Styrene	0
Toluene	0
Tribenz[a,c,h]anthracene	0
1,2,3-Trimethylbenzene	0
1,2,4-Trimethylbenzene	0
1,3,5-Trimethylbenzene	0
1,3,6-Trimethylnaphthalene	0
Xylenes (o-, m-, p-)	0

※ 0 : 담배연중에서 확인된 물질

enz (a. c) anthracene 포함하여 인용 되었다. Capillary column 상에서는 이들 화합물들은 benzo (g. h. i) perylene, benzo (b) fluoranthene, 그리고 dibenz (a. f) anthracene 으로 각각 elute 되며 이들 모두 연기 성분으로 입증 되었다. 이들 새로운 PAH의 존재는 확인을 요한다. 연중에 있는 BAP와 PAH를 결정하는 발표된 분석적 방법이 있으며 질련, 염권, 파이프 연기에어른 값을 검토하였다. 분리중에 BAP의 다소의 손실이 있으므로 정확한 결과를 얻기 위해서는 방사선 표시 사용이 필요하며 연구들은 Perylene 을 방사선 BAP 대체물로 사용할지라도 C₁₄-표식 탄화수소를 사용하였다. 아비산화물을(제 1 비소산화물) 제외하고 어느 방사성핵종 그리고 논쟁 대상이 되고있는 nitrosamines, 연중에서 유일하게 알려진 종양 개시 인자는 PAH와 이종 원자고리화합물인 유사체이다. 화학적인 분획시 연기 응축물의 종양활성화의 분포에 따르면 종양 개시 물질 배반은 Hexane 혹은 사염화탄소에 의한 silicic 산 칼럼으로부터 씻어나오는 중성 subfraction 에서 일어난다. 이들 subfraction 은 연기의 많은 발암성 PAH를 포함한다. 예를들면 benzo(a)-pyrene 그러나 동물에서 연기 응축물의 총 종양성을 설명하기에는 양이 너무적다. PAH 기여와 전체적인 활성은 산성 분획에 있는 보 발암성분의 활성으로 설명된다. 예를들면 P-phenol 류는 그자신 활성을 갖지않는 PAH 의 종양개시하는 성질을 보충하는 행동을 한다. 그러나 data 는 benzo(a)pyrene 수준은 종양을 개시하는 성질에 직접 관련이 없는 것으로 보여주는 것으로 나타냈다. 반면 benzo(a)pyrene 에서 감소는 다른 연기 시료들의 상대적 tumorigenicity 를 결정하기 위하여 여러가지 기준 가운데 하나로 적용하였고 그런 기준의 사용을 확인하는 생물학적 data 가 얻어졌다. 그래서 어떤 화합물이 연기의 종양발생활성에 대한 책임이 있는가에 대한 의문은 단언적으로 답할수 없다. 페닐류와 PAH의 상호작용이 효과에 오로지 책임이 없다고 가정하면 두개의 가능성이

분명하다. 아직 확인되지 않은 종양 개시 인자와 종양 촉진제가 연기안에 존재하거나 여러가지 알려진 생물학적으로 활성인 화합물이 그 안에서 상승작용 반대작용 부가효과를 포함하는 하나의 작용 방식으로 상호작용한다. PAH 가 순수화합물의 발암성을 감소시키는데에 경쟁적으로 작용할지도 모르는것을 보여주는 data 가 나타났다. PAH 혼합물의 생물학적 활성은 깊이 연구되지 않았으며 이 방면에 더욱 정보가 요망된다. 이것에 관하여 Chrysene, 약한 혹은 어중간한(bordeline) 발암물질은 강한 촉진제인 croton 수지 존재하에서 강력한 종양 개시제로 작용함을 보여주었다. 확실한 dibenzopyrenes, naphthopyrenes, 그리고 indenopyrenes 들의 합성과 생물학적인 활성도 연구되었다. 담배연기에서 발견된 발암성 여러 고리화합물(Polynuclear compounds)은 다핵 질소를 포함하는 이원질소고리화합물(polynuclear nitrogen-containing heterocyclics) 을 포함하여 7 으로부터 17화합물로 나타났다. 화합물수에서 차이는 생물학적 data 의 부족이 많은 PAH에 대해 존재하기때문에 경계선을 긋는 발암성 활성을 갖는 화합물의 상대적 중요성을 저자의 해석상의 반영일 것이다. 모든 표에서 빠져서 이채를 띠는 것은 많은 열분해 산물에서 발견되는 강력한 발암물질인 2-methyl-olanthrene 으로 담배연기에서는 보고되지 않았다.

2. sterol and oxygenated isoprenoid compounds.

잎담배와 담배연기 성분들의 특징을 명백히 하기위한 놀랄만한 진보가 이루어지고 있으며 이전에 어떤 식물체에서도 발견되지 않은 여러 화합물들이 분리 및 확인되고 있다.

1) sterols

잎담배 및 담배 연기중 유리 및 결합된 형태의 stigmasterol, campesterol 및 β -sitos-

terol의 존재는 잘 확립되었다. 이들 화합물 모두는 C₂₇위치에 endocyclic 불포화와 탄소의 수가 변화하는 C₁₇위치에 측쇄를 갖는 3-β-hydroxysterol들이다. Campesterol은 잎담배 중에서 최초로 유리된 형태로 발견되었으며 후에 잎담배 중에서는 ester로서 담배연기 중엔 배당체로서 발견되었다. 비록 잎담배중에서 유리된 형태의 ergosterol의 분리에 관해서는 단지 한편의 논문에서 설명되고 있지만, ergosterol과 유사한 자외선 스펙트럼을 갖는 Δ^{5,7}sterol이 아르헨티나 담배의 연기성분에서 발견되었다. 여러해전 새롭고 독특한 담배 sterol이 잎담배중에 존재하는 것으로 보고되었으며 그 뒤 Chalinasterol로서 여러사람들에 의해 잘못 인용되었다. 그때에는 이 sterol의 확인은 녹는점과 sterol 및 sterol유도체의 적외선 스펙트럼에 근거하여 이루어졌지만 뒤에 G.C를 이용하여 이와같은 확인은 재평가되어 최종적으로 이 sterol은 stigmasterol, β-sitosterol 및 campesterol의 혼합물인 것으로 밝혀졌다. 잎담배중에 β-sitosterol이 존재한다는 가능성은 제시되었지만, 그러나 어떤 결정적인 연구보고도 제시되지 않았다. 초기의 문헌에서, 유리된 형태의 γ-sitosterol은 잎담배와 담배연기 양쪽 모두에 존재하는 것으로 보고되었다. 그러나 연구결과 γ-sitosterol은 β-sitosterol과 campesterol의 혼합물인 것으로 알려졌다. 황색종 담배중 에스테르화된 Cholesterol의 존재가 보고되었다. 이러한 보고는 식물체중에 cholesterol이 존재한다는 사실이 불과 지난 몇년 동안에 얻어진 것에 비추어보면 다소 예기치 않은 일이다. 조 혼합물(crude mixture)에서 에스테르화된 cholesterol과 다른 sterol들(stigmasterol, β-sitosterol, campesterol)의 초기의 분리는 gel permeation chromatography(겔투과 크로마토그래피)와 countercurrent distribution(역류 분배)가 효과적이다.

cholesterol은 실릴화 및 아세틸화된 유도체들의 preparative scale gas chromatography를 이용하여 sterol혼합물을 더한층 분리한후

mass스펙트럼상의 특성에 의해 주로 확인되었다. 잎담배중에 ketosterol의 존재는 제시되었지만, 그러나 ketosterol의 구조에 대한 어떠한 정보도 제시되지 않았다.

Campesterol, β-sitosterol 및 stigmasterol외에도, 조직배양으로 생장한 담배는 cycloartenol, 24-methylenecycloartenol, citrostadienol 및 28-norcitrostadienol을 함유하고 있다. 이들 sterol의 확인은 Mass 및 NMR스펙트럼 특징과 steryl 유도체들의 녹는점을 측정하여 가능하다. 그밖에 cholesterol과 일치하는 분자량을 갖는 sterol이 발견되었지만, 아직까지 확인되지 않았다. C¹⁴-labeled 초산나트륨 용액에서 신진대사가 일어나는 어린엽에서 cycloartenol이 존재하는 것으로 알려졌다. 잎담배와 담배연기중의 sterolins은 stigmasterol, β-sitosterol 및 campesterol을 배당체와 시킨다. 비록 이들 화합물이 열에 불안정하지만, 250°C 대기압하에서 이들화합물이 증류하는 것으로 이 배당체들은 변화하지 않고 담배연기로 이행할수있음을 알려주고 있다. 일부 호르몬 합성시 출발물질로서 sterol의 수준에 대한 연구는 광범위하게 진행되어왔다. 총 3-β-hydroxysterols은 불포화의 존재 또는 수산기의 확인에도 불구하고 3-β-hydroxysteroid를 침전시키는 steroidal saponin인 digitonin으로 침전시키는 것에 기초를 둔 gravimetric 방법에 의해 측정되어진다. 이 시약을 사용해서 잎담배중 전체유리및 결합된 형태의 steroid 농도는 담배형태에 따라 변화하는 것을 알수 있으나 최대수준(엽중량중 약0.45%)은 phyosterols의 경제적 출처로서 담배를 고려하기에는 너무 낮다. 또한 전체 phytosterol의 수준과 담배품질 사이의 어떤 관계도 알려지지 않았다. 담배중의 sterol들은 담배연소 동안에 열분해에 의해 다핵 방향족 탄화수소를 생성한다든지 또는 건조나 숙성동안에 자동산화에 의해 hydroperoxide 및 관련 화합물들을 생성하는것 같은 담배연기의 생화학적 인 효과에 약간의 역할을 한다고 볼수있다. 이

Table VI

STEROLS, OXYGENATED TERPENES, AND OTHER ISOPRENOIDS
IN TOBACCO LEAF AND SMOKE

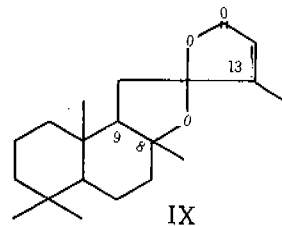
Sterols	Leaf	Smoke
Sterols		
Campesterol	o	o
Cholesterol	o	...
Ergosterol	o	...
β -Sitosterol	o	o
Stigmasterol	o	o
Monoterpenes		
Borneol	o	...
1-Linalool	o	...
Diterpenes		
3,8,13-Duvatriene-1,5-diol (α -, β -)	o	...
4,8,13-Duvatriene-1,3-diol (α -, β -)	o	...
12 α -Hydroxy-13-epimanoyl oxide	o	o
α -Levantanolide	o	...
Levantanolide (α -, β -)	o	o
α -5,8-Oxido-3,9,13-duvatrien- 1-ol	o	o
α -5,8-Oxido-3,9(17),13-duva- trien-1-ol	o	o
β -5,8-Oxido-3,9(17),13-duva- trien-1-ol	o	...
Phytol	...	o
Triterpenes		
β -Amyrin	o	o
Tetraterpenes		
Cryptoxanthin		...
Flavoxanthin		...
Lutein		...
Neoxanthin		...
Violaxanthin		...
Zeaxanthin		...
Trisquarterpene		
Solanosol	o	o
Related Isoprenoids		
6,8-Dihydroxy-11-isopropyl- 4,8-dimethyl-14-oxo-3,9- pentadecadienoic acid	o	...
Farnesylacetone	...	o
Hexahydrofarnesylacetone	o	o
Solanochromene	o	...
Solanone	o	o
Tocopherols	o	o
Vitamin K ₁ (2-methyl-3- phytyl-1,4-naphthoquinone)	o	...

※ o : 잎담배 또는 연중에서 확인된 물질
... : 잎담배 또는 연중에서 미확인된 물질

점에 있어서 cholesterol 의 hydroperoxide 는 발암물질로 알려져 있으며 stigmasterol 은 75 °C에서 열분해시 benzo[a]pyrene 을 생성한다. 또한 sterol 의 조 혼합물(crudemixture)의 열분해 생성물은 동물에대해서 발암효과를 나타내는 것으로 알려지고 있다.

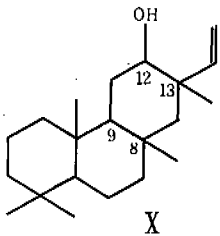
2) Oxygenated isoprenoid constituents.

monoterpene 인 borneol 과 1-linalool 은 열중에 존재하는 것으로 보고되었지만 그후 이들의 존재에 대한 어떠한 확인도 발표되지 않고 있다. Geraniol 이 최초로 담배연기응축물중의 한 성분인 것으로 알려졌지만 후에 이 물질은 solanosol 로 추정되었다. 최근 담배와 담배연기중에서 여러 새로운 diterpene 화합물들이 분리되었다. levantenolides 는 Turkey 산 담배 1000파운드의 hexane 추출물에서 얻어진 labdanolic acid 와 관련이 있는 epimeric lactones 이다. α -Levantenolide (IX) 가 β -epimer 보다 열중에 더 많은 양이 함유되고 안정하지만 두화합물 모두 열중 미량 성분(열중량중약0.0034%)이다.



이 epimer 들의 기본구조 측정에 있어, 수소 첨가와 스펙트럼 분석결과 β -methylvinyl-lactone group 을 갖는 단일 불포화(monounsaturated) 화합물의 존재를 나타냈다. LiAlH₄ 로 환원, hydrazine 과의 반응 또는 비누화와 Lactone 화는 각기 두 epimer 에서 triol, pyridazone 또는 lactone 을 생성하며 C₁₁ 위치에 lactone환이 결합되어 있는 것으로 나타냈다. 이들 반응들에 있어서 전환이 쉬운점은 third

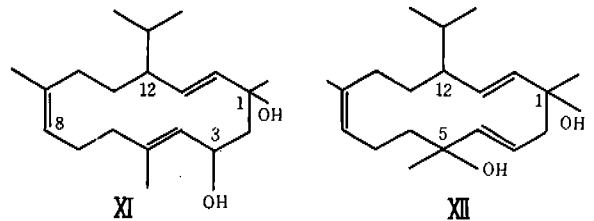
oxygen이 C₁₂위치의 탄소에 연결되어 있는것을 나타내며 구조상에 hemiketal 또는 hemiacetal moiety의 존재를 시사하는 것이다. 기본 골격은 Wolff-Kishner조건하에서 KOH로 dihydropyridazone을 처리할때 epimeric labdanolic acid가 생성되는 것으로 확실시 되었다. 구조에 대한 더 한층의 증거는 오존화와 polyol 또는 tricyclic lactone을 생성하는 환원 또는 산화 가수분해에 의해 얻어졌다. α-Levantanolide는 Turkey산담배에서 발견된 α-levantenolide의 epimeric dihydro유도체이다. 이 terpene의 구조는 α-levantenolide의 환원생성물과 비교 연구후에 정해졌다. 측매 수소 첨가는 그들 각각의 mass스펙트럼에 있어서 P/P-15ions의 비가 크게 다른 두 epimer (α₁, α₂)를 생성했다. C₁₃위치의 methyl group의 비교적 적은 Steric 장애를 갖는 epimer가 더 쉽게 분열되기 때문에 보다 높은 비를 갖는 화합물이 13-(S)배열을 가지며 α₂로 명명되었다. 이러한 명명의 근거는 위의 배열을 갖는 것으로 알려진 methyl 13-epilabdanolate를 생성하는 일련의 반응들에 의해 얻어졌다. 12α-Hydroxy-13-epimano-yl oxide(X)가 Turkey산 담배의 잎과 연기에서 분리되었다.



수소첨가, 원소 및 스펙트럼 분석 및 active hydrogen determination이 두개의 산소, 하나의 수산기, 하나의 ether과 맨끝에 vinyl group을 갖는 monounsaturated알코올의 존재를 밝혀 주었다. 분리된 화합물과 알려진 13-epimano-yl oxide의 nmr스펙트럼은 α-C₁₂수산기에 의한 차이를 제외하고는 유사하다. 분리된 화합물과 일부 알려진 diterpene들(sclareol, manoyl oxide, manool)간에 mass스펙트럼 상의

유사점이 분리된 화합물의 기본 골격을 확실하게 해 주었다. 오존화와 ozonide의 산화 가수분해는 각각 가정된 구조와 일치하고 알려진 구성원소를 갖는 16 및 18 탄소원자의 Lactone과 acetoxy acid를 생성한다. 분리된 화합물의 산화는Wolff-Kishner환원에서 dihydro-13-epimano-yl oxide를 형성하는 12-keto유도체를 생성한다. 수산기 group의 배열은 nmr스펙트럼과 담배 분리물에 있어서 얻어진 생성물과 유사하지 않은 포화된 equatorial alcohol을 생성하는 dihydro-12-keto-13-epimano-yl oxide의 stereospecific환원에 의해 확립되었다.

Diterpenoid divatrienols과 관련 물질들은 cembrene을 제외하고는 이전에 천연생성물에서 발견되지 않았던 일련의 치환된 거대한환상올레핀(substituted macrocyclic olefin)들이다. 이 group의 두 diols에 관해 제시된 구조는 VI과 VII에 나타냈으며 두 diol의 C₁ epimer가 켈런담배에서 분리되었다.

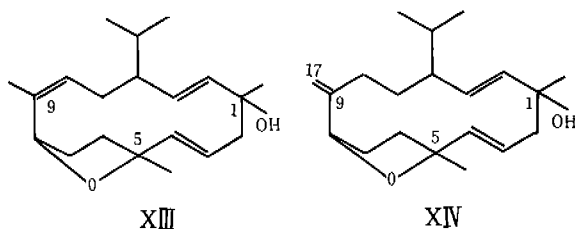


1,3-diols (XI)의 경우, 두개의 수산기 (하나는 secondary, 하나는 tertiary), 3개의비핵치환 이중결합 그리고 하나의 isopropyl을 갖는 C₂₀화합물인 것으로 원소분석, 스펙트럼분석 및 관련 분석결과 나타났다. α-XI의 perhydro유도체의 산화는 C₁-C₂결합의 alkaline분열에 있어서 diketone을 생성하는 ketoalcohol을 생성한다. 이 diketone의 Hypiodite산화는 두개의 methyl-keto group의 존재를 나타냈으며 C₁에서 C₃까지의 부분적인 구조를 확립시켰다. MnO₂로 α-XI의 C₃수산기를 산화시키면 Carbonyl group이 단일 methyl group을 갖는 3치환된 에틸렌 결합(trisubstituted ethylenic bond)과공핵결합 하고있는 ketoalcohol을 생성하며 C₂

에서 C₁까지의 부분에 대한 더 한층의 정보를 주었다. 이 ketoalcohol의 Retroaldol 반응은 C₁과 C₂사이에서 환의 절단을 일으키어 생성물은 methine carbon에 이웃한 trans 이중결합으로 하나의 carbonyl과 공핵결합하고 있는 diketone 인 것으로 자외선 및 nmr 스펙트럼 분석 결과 나타났다. 그리하여 C₁-C₅ 및 C₁₂-C₁₄의 부분적인 구조의 대부분이 확립되었다. NaOH 안에서 diketone 을 환류하면 acetone 을 분리해내며 그리고 하나의 비공핵 결합을한 methyl-substituted carbonyl 을 갖는 새로운 diketone 을 형성한다. 이 경우 C₃-C₄ 결합에 분열이 일어나며 이 반응으로 C₃-methyl group 의 위치를 확립했다. α-XI 의 nmr 스펙트럼은 methine carbon 에 붙어있는 isopropyl group 내에 methyl group 의 존재를 나타냈으며 C₁₂ 위치에 있는 것으로 나타났다. 그리하여 C₁₂~C₁₄ 및 C₁~C₅ 부분의 구조를 상하게 확립 할 수 있었다. 남아있는 3 치환 올레핀의 결합(trisubstituted olefin bond)의 위치는 C₈ 및 C₁₃ 이중결합의 산화분열에 기인하는 산화생성물인 levulinic acid 및 5-keto-2-isopropoxyhexanoic acid 의 분리에 의해 결정되었다. 유사한 반응이 β-XI 에서도 일어나며 비록 C₃ 위치에서 epimerism 이 일어날 가능성을 갖고 있지만, 어떤 경우에 있어서도 α 및 β 화합물에서 일반적인 생성물의 분리는 화합물이 C₁ epimer 인 것을 가리킨다. 이중결합의 기하학적인 배향은 뒷바침 할 수 있는 data 없이 cis로 선정된 Δ⁸을 제외하고는 분광학적인 분석 또는 acyclic system 과의 유사점에 의해 확립되었다. epimeric 1,5-diols (XII)은 일반적인 환 system 을 나타내는 탈수 및 수소 첨가시 1,3-diols 에서 처럼 포화 탄화수소를 생성한다.

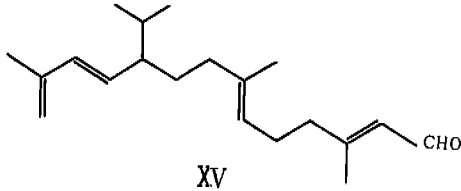
allylic tertiary hydroxyl, trans-disubstituted olefinic 결합 하나의 C(CH₃)=C group CH₃COH group 및 간섭(hindered) isopropyl group 이 여러 분석결과 나타났다. β-XI 과 β-XII의 chromic acid 산화는 diol들이 일반적으로 유사하다는 것을 확인해 주고 생

하건데 산화 동안에 β-XII가 β-XI로 allylic 전위하는 것을 시사해주는 β-4,8,13-duxatrien-1-ol-3-one 을 생성한다. 그밖에 C₉에서 C₁₃까지의 부분적인 구조에 있어서 XII과 XIII이 일반적으로 유사하다는 것을 확인 할 수 있는 Levulinic acid 와 5-keto-2-isopropylhexanoic acid 를 분리하였다. 비록 alumina 를 사용한 칼럼 크로마토그래피(column chromatography) 시 XII의 두 이성체가 XIII의 이성체로 전위하지만, 1,5-diols 은 적절한 예방조치가 실험 동안에 취해지는 한 실험실적 조작시 1,3-diols 에서 생성되는 화합물은 아닌 것으로 생각된다. 잎담배 0.0015%에 상당하는 양의 β-XII이 분리되었다. Table IV 중의 duxatrienol ether은 황색중, 버어리 및 터기 신 담배에서 처음으로 분리되었으며 후에 담배 연기 중에서도 분리되었다. 이들 화합물중 ether 결합의 존재는 활성수소 분석(active hydrogen analysis) 이 원소 분석과 분자량 측정에 의해 발견된 두 개의 산소 중 단지 하나만을 설명하는 것으로 간접적으로 확인되었다. XIII의 경우, ether 결합의 위치는 nmr 분석에 의해 8,9-유도체가 되는 것으로 밝혀진 epoxide 를 생성하는 α-XI 의 perbenzoic acid 산화에 의해 알려졌다.



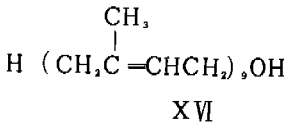
8,9-epoxide 의 α-XIII 으로의 전환이 그뒤 다양한 조건하에서 이루어졌다. C₁수산기의 배향(orientation)은 α-XI과의 유사한 점에 의해 확인되었다. 원소 분석에 있어서의 유사한 점과 α-XIII과 α-XIV의 탈수 및 수소 첨가 생성물에 의해 다른 oxidoduxatrienol 의 구조가 결정되었다. C₉위치 내의 exocyclic 불포화의 존재는 nmr 스펙트럼 data 에서 유추 할 수 있

다. duvatrienols 구조의 C₃₀ olefinic 결합의 배향(orientation)에 대한 더 한층의 증거가 얻어졌다. 담배 꽃의 성분에 대한 연구에서 4, 8, 13-duvatriene-1, 3-diol(XI)의 β 이성체와 p-toluenesulfonic acid와의 반응에서 얻어진 생성물과 일치하는 all-trans C₃₀ aldehyde(XV)가 분리되었다.



이러한 증거를 근거로 하여 α 및 β-XI 내의 C₃₀ 이중결합은 실제로 추정된 것은 아니지만 처음에 제시되었던 cis 보다는 trans 인 것으로 주장할 수 있다. diterpenoid alcohol 인 phytol 이나 triterpenoid alcohol 인 β-amyrin 을 포함하는 여러가지 ester 들이 최근에 담배와 담배 연기 중에서 발견되었다.

고분자량의 terpenes 중, solanesol(XVI)은 연초 화학보다는 다른 분야의 연구자들에게 더 관심을 끌고 있다.

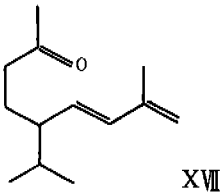


황색종 담배에서 처음으로 solanesol 이 분리되었으며 지금은 비교적 여러 식물에 함유되어 있는 성분으로 믿어지고 있다. 쥐와 사람의 간 조직에서 solanesol 이 검출되는 것은 solanesol 을 함유하는 식품의 섭취에 기인 한다고 볼 수 있다. 처음에는 solanesol 이 pentaterpene 인 것으로 알려졌지만 후에 연구는 단지 9개의 isoprenoid unit 의 존재를 확인했다. Solanesol 은 ubiquinone 이나 vitamin K 상사물과 같은 신진대사가 활성인 quinones 의 실험가치 때문에 생화학자들의 관심을 끌고 있다. solanesol 전체의 합성은 cis 와 trans 형태의 alcohol 이 얻어지는 것에서 보고되고 있다. 천연 이성체인 trans 화합물은 고체상태에

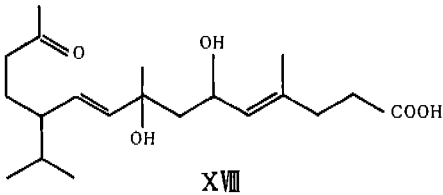
서 서로 다른 응점과 분광학적 특징을 갖는 α 와 β의 두가지 형태로 존재한다. α 형태는 평평하고 β 형태는 서로 구부러져 있는 연속적인 isoprene unit 를 갖는 것으로 X-선 회절연구 결과 밝혀졌다. 잎담배 중에서 solanesol 은 olefinic 상사물 또는 이성체들과 산화 생성물들을 동반하여 이들 solanesol 이 같은 물질(SLS)의 분석 방법이 개발되고 있다. SLS의 양은 담배 형태에 따라 1.9%에서 2.5%까지로 비교적 높으며 이들 물질의 대부분은 solanesol 인 것으로 믿어진다. 비록 옆의 품질과 SLS의 함량값에 어떤 확실한관계도 알려지지 않았지만 solanesol 은 적어도 부분적으로는 담배 연기중의 dipentene 성분에 영향을 미치는 것으로 열분해 연구결과 밝혀졌으며 이러한 점에 미루어 solanesol 은 담배 연기의 향에 간접적으로 영향을 미친다고 볼 수 있다. 또한 solanesol 과 다른 열중 terpene 화합물들은 담배 연기중 다핵 방향족 탄화수소 화합물들의 주요 전구 물질인 것으로 추정되고 있다. solanesol 을 쥐의 피부에 사용하면 비후나 피지선의 파괴등을 일으키지 않는다.

Solanesol 은 유리된 형태와 ester화된 형태로 열중에 존재한다. Isoprenoid benzopyran, Solanochromene 의 구조가 Solanesol 의 구조와 비교하여 부분적으로 밝혀지면서 이들 성분의 구조는 하나적은 isoprene unit 를 포함하고 있는 것으로 수정되었다. solanochromene 은 산으로 세척되는 알루미늄에서의 크로마토 그래피 분리동안에 Kofler quinone(2,3-dimethyl-7-solanesyl-1,4-benzoquinone)의 이성화로 형성된다. 잎담배와 담배연기 성분 중에는 많은 terpene 의 산화 또는 분해 생성물이 존재한다. L-(t)-Solanone(XVII)이 Cigarette tabaccos 에서 처음 분리되었으며 그후 cigarette 및 cigar 의 연기 성분에서도 분리되었다.

이 화합물은 원소분석, 관능기 시험, 산화분해 nmr 스펙트럼분석 및 합성에 의해 특성을 알게 되었다. 상반된 광회전을 제외하고는 수소 첨



가된 담배 분리물과 꼭 같은 화합물을 생성하는 D-3-isopropyl-6-ketoheptanal 에서 *perihydrosolanone* 의 D-(5) 거울상 이성질체의 합성에 의해 L배열에 확인되었다. 그후 연구결과 *Sulanone* 의 *isoprenid* 전구물질(XXVIII) 의 두 이성체가 잎담배에서 분리되었으며 *solanone* 의 특징을 분석하는데 이용된 일반적인 방법에 의해 그 특징이 기술되었다.



XVIII 화합물은 담배의 경작, 건조, 가공 동안에 *duvatriene-1,3-diols* (XI) 의 Δ^8 결합이 산화 분열하여 생성된다. α -XI 은 상온에서 아주 불안정하고 산에 민감하기 때문에 XVIII 은 실험실 조작 동안에 α -XI 에서 일부 생성될 것으로 여겨진다. *Farnesyl acetone* (XIX) 이 Cigar

의 연기 응축물에서 분리되었으며 이 분리된 화합물 및 그것의 수소 첨가된 생성물과 합성된 XIX 및 *hexahydro XIX* 간의 GC 및 분광학적인 비교에 의해 확인되었다. *Hexahydrofarnesylacetone* 또한 담배연기에서 발견되었으며 *Phytol* 또는 *dihydroneophytadiene* 의 오존화에 의해 생성된 C_{20} ketone 과의 GC 및 분광학적 특징의 유사한 점에 의해 확인되었다.

Monohydroxy α -Carotene, *β -Carotene aldehyde* 및 *α -ionone* 을 포함하고 있는 burley 염에 몇개의 부분적으로 *isoprenoid* 특징을 갖는 화합물이 함유되어 있는 것으로 알려졌다. *Phytol* 을 함유하고 있는 담배 연기의 조분획 (*crude fraction*)에 대한 연구결과, *isoprenoid* 구조를 갖는 것으로 믿어지는 여러 불포화 alcohol 이 또한 분리되었다. 알콜과 알콜의 산화 생성물의 GC 및 스펙트럼 특성에 근거하여 *farnesol*, *dihydrofarnesol* 및 C_{20} , C_{22} , C_{24} alcohol 의 특성을 갖는 화합물들이 확인되었다. 담배형태에 따라 연기중의 *isoprenoid* 화합물들의 농도가 대략적으로 추산되었다. *Neophytadiene*, *Phytadienes*, *Squalene*, *Solanenes*, *α -tocopherol* 및 유리 또는 에스테르화된 형태의 *Solanesol* 과 *Phytosterol* 의 양이 상당한 것으로 밝혀졌지만 담배 형태에 따라 큰 차이를 나타내진 않았다.