

쑥에서 분리한 Phenylpropanoid 화합물¹⁾

박중철* · 양한석* · 유명범** · 이종호**

순천대학교 한약자원학과 · *부산대학교 약학대학 · **경상대학교 식품영양학과

Isolation of Phenylpropanoids from the Herb of *Artemisia princeps* var. *orientalis*¹⁾

Jong Cheol Park*, Han Suk Young*, Young Beob Yu** and Jong Ho Lee**

Department of Oriental Medicine Resources, Sunchon National University, Sunchon 540-742,

*College of Pharmacy, Pusan National University, Pusan 609-735 and

**Department of Food and Nutrition, Kyeongsang National University, Jinju 600-701, Korea

Abstract—From the herb of *Artemisia princeps* var. *orientalis* *o*-coumaric acid and 4,5-*O*-dicafeoylquinic acid were isolated and identified by chemical and spectral analysis.

Keywords—*Artemisia princeps* var. *orientalis* · *o*-coumaric acid · 4,5-*O*-dicafeoylquinic acid · dicafeoylquinic acid

쑥 *Artemisia princeps* var. *orientalis*은 어린 잎과 지상부를 식용하며, 한방에서는 艾葉이라 하여 지혈, 통경, 부인병²⁾ 등에 사용되고 있다. 쑥에서 2종의 phenylpropanoid 화합물을 분리하여 그 구조를 결정하였기에 보고한다.

실험 방법

실험재료 및 기기—쑥은 1992년 5월 전남 승주군 서면에서 채집하여 감정한 후 음건 세절하여 사용하였으며, 표본은 순천대 한약자원학과 표본실에 보관중이다. 용점은 Perkin-Elmer Electrothermal Digital MP apparatus, IR spectrum은 Hitachi 270-50, UV spectrum은 Shimadzu Mps-50L spectrophotometer, Mass spectrum은 Kratos MS 25 RFA, NMR spectrum은 Bruker AM 200 spectrometer를 사용하여 측정하였다.

추출 및 분획—음건세절한 쑥 (300 g)을 수욕

상의 환류병각하에서 MeOH로 3시간동안 3회 열수추출하여 MeOH 엑스를 얻었다. 이를 10% MeOH에 현탁 시킨 후 용매분획을 실시하여 얻은 EtOAc 분획분을 silica gel column의 상층에 넣은 후 CHCl₃-MeOH-H₂O(7:3:1, 하층) 및 CHCl₃-MeOH-H₂O(65:35:10, 하층)의 용매로 용출시켜 화합물 1을 분리하였으며, 다시 극성이 큰 분획을 모아 Sephadex column chromatography(10% MeOH, MeOH)를 실시하여 화합물 2를 분리하였다.

화합물 1—mp 210~212°, FeCl₃ 반응: 양성; IR, ν_{\max} (cm⁻¹) 3400, 1665, 1620, 1460, 1430, 1090, 990, 750; UV, λ_{\max} (MeOH) nm 281, 323; MS, m/z 164[M⁺]; ¹H-NMR (DMSO-d₆, 200 MHz) δ : 7.81(1H, d, $J=16.1$ Hz, H-3), 7.55(1H, d, $J=8.0, 1.5$ Hz, H-9), 7.21(1H, td, $J=8.0, 8.0, 1.5$ Hz, H-8), 6.88(1H, td, $J=8.0, 8.0, 1.5$ Hz, H-7), 6.79(1H, d, $J=8.0, 1.5$ Hz, H-6), 6.50(1H, d, $J=16.1$ Hz, H-2); ¹³C-NMR (DMSO-d₆, 50.3

*Corresponding author

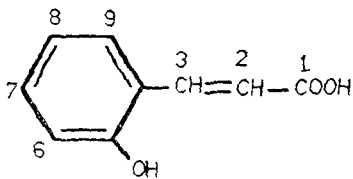
MHz) δ : 168.1(C-1), 156.6(C-5), 139.6(C-3), 131.4(C-7), 128.7(C-9), 120.9(C-4), 119.4(C-8), 118.3(C-2), 116.2(C-6).

화합물 2—mp 192~194°, FeCl₃ 반응: 양성; IR, ν_{max} (cm⁻¹) 3400, 1700, 1610, 1530, 1460, 1390, 1290, 1180, 990, 820; ¹H-NMR(DMSO-d₆, 200 MHz) δ : 7.45(1H, d, *J*=15.7Hz, H-7''), 7.41(1H, d, *J*=15.7Hz, H-7'), 6.99(2H, s, H-2'', 2'), 6.94(2H, d, *J*=8.2Hz, H-6'', 6'), 6.72(1H, d, *J*=8.0Hz, H-5''), 6.70(1H, d, *J*=8.0Hz, H-5'), 6.20(1H, d, *J*=15.7Hz, H-8''), 6.14(1H, d, *J*=15.7Hz, H-8'), 5.52(1H, m, H-3), 4.93(1H, m, H-4), 4.19(1H, bs, H-5).

화합물 2의 가수분해—화합물 2(50 mg)을 2N-HCl로서 5시간동안 가수분해한 후 상법에 의해 처리하였을때 caffeic acid와 quinic acid를 표준품에 의해 검출하였다.

실험결과 및 고찰

화합물 1은 FeCl₃ 반응에서 양성을 나타내고, IR spectrum의 관측에서 phenolic 화합물임을 알 수 있다. ¹H-NMR spectrum에서는 δ 6.50과 δ 7.81의 peak가 각각 16.1Hz로 coupling 하므로서 *trans* olefinic proton이 존재함을, δ 6.79(1H, d, *J*=8.0, 1.5Hz)와 δ 7.55(1H, d, *J*=8.0, 1.5Hz)의 signal은 2치환 aromatic ring의 proton들이 각각 *ortho*, *meta* coupling 함을 알 수 있다.

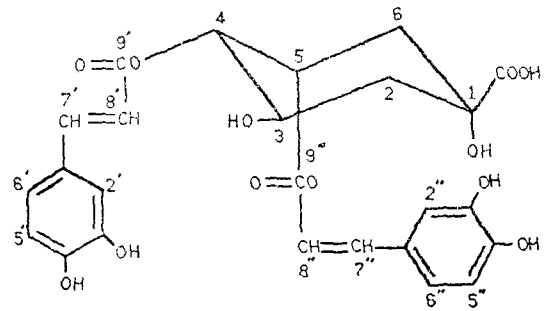


1

따라서 이 화합물은 전형적인 C₆-C₃ 화합물로 추정하였다. δ 6.88(1H, *J*=8.0, 8.0, 1.5Hz)과 7.21(1H, *J*=8.0, 8.0, 1.5Hz)의 signal 관측으로 aromatic ring 중의 hydroxyl기가 C-5 위치에 결합하고 있는 *o*-coumaric acid임을 알 수 있었으며, ¹³C-NMR spectrum의 문헌치³⁾와의 일치

에서 이러한 사실을 뒷받침하고 있다. 그리고 표준품(Sigma 제품)과의 ¹H-NMR data 비교에서도 잘 일치하므로 이 화합물은 *o*-coumaric acid로 결정하였다.

화합물 2는 FeCl₃ 반응에서 청색을 나타내고, IR spectrum의 관측에서 역시 phenolic 화합물임을 알 수 있었다. 화합물 2의 ¹H-NMR을 보면 aromatic field에서 *J*치가 15.7Hz인 δ 7.45(1H, d), 7.41(1H, d) 및 6.20(1H, d), 6.14(1H, d) peak들의 관측으로 *trans* coupling하는 각각 2H분의 olefinic proton signal, 또한 δ 6.99(2H, s), 6.94(2H, d, *J*=8.2Hz) 6.72(1H, d, *J*=8.0Hz), 6.70(1H, d, *J*=8.0Hz)의 signal 관측으로 2몰의 caffeoyl기가 존재함을 암시하였다. 이 화합물은 spectrum용매가 같은



2

DMSO-d₆로 측정된 chlorogenic acid⁴⁾의 ¹H-NMR spectrum과 유사하므로 quinic acid에 caffeoyl기가 2분자 결합하고 있는 dicafeoyl quinic acid로 추정하였다. 화합물 2를 산 가수분해할때 caffeic acid 및 quinic acid를 얻을 수 있으므로 이러한 사실을 확인할 수 있었다. Caffeoyl기의 결합 위치는 Kido⁵⁾ 등의 수종 dicafeoyl quinic acid를 ¹H-NMR 데이터로 비교한 문헌에서 화합물 2는 quinic acid의 C-4,5 위치에 결합하고 있음을 알 수 있으므로 이의 화학구조는 4,5-O-dicafeoylquinic acid로 결정하였다.

결 론

축에서 분리한 화합물 1 및 2는 이화학적 성상 및 분광학적 분석에 의해 *o*-coumaric acid 및 4,5-O-dicafeoylquinic acid로 각각 결정하였다.

감사의 말씀—이 연구는 한국과학재단 연구비 지원(과제번호: 931-0600-015-2)에 의한 결과의 일부이며 이에 감사드립니다.

<1994년 1월 6일 접수: 1월 25일 수리>

문 헌

1. 한국산 식용식물의 화학성분과 생리활성(Ⅵ).
2. 김재길: 원색천연약물대사전 (상), 남산당, p. 244 (1984).
3. Sakate, T., Murakami, T., Saiki, Y. and Chen, C.: *Chem. Pharm. Bull.* 31, 3865 (1983).
4. 양한석, 박종철, 박희준, 이지현, 최재수: *Arch. Pharm. Res.* 14, 114 (1991).
5. Morishita, H., Iwahashi, H., Osaka, N. and Kido, R.: *J. Chromatogr.* 315, 253 (1984).