

## 황정(黃精) 추출물의 화학구조 결정에 관한 연구(II)

신동수<sup>†</sup> · 김홍재 · 조수동 · 권기락 · 안철진 · 주우홍\* · 강진호\*\* · 문병호\*\*\*

창원대학교 화학과, \*창원대학교 생물학과  
\*\*경상대학교 농학과, \*\*\*서울대학교 농업과학 공동기기센터

### Studies on Chemical Structure Determination of *Polygonatum sibiricum* Extracts(II)

Dong-Soo Shin<sup>†</sup>, Hyeung-Jae Kim, Su-Dong Cho, Ki-Lak Kwon, Chul-jin Ahn  
Woo-Hong Joo\*, Jin-Ho Kang\*\* and Byoung-Ho Moon\*\*\*

Department of Chemistry, Changwon National University, Changwon 641-773, Korea

\*Department of Biology, Changwon National University, Changwon 641-773, Korea

\*\*Department of Agriculture, Gyeongsang National University, Chinju 660-710, Korea

\*\*\*Public Instrument Center of Agriculture Science, Seoul National University, Seoul 441-744, Korea

#### Abstract

Biologically active compounds in *Polygonatum sibiricum* were extracted using organic solvents as hexane, CHCl<sub>3</sub>, *n*-butanol corresponding each component. Compound II was purified from hexane layer and the chemical structure of compound II was characterized using <sup>1</sup>H-nmr, <sup>13</sup>C-nmr, DEPT135, COSY, HMQC, HMBC spectrum and MS-spectrum. Consequently, the chemical structure of compound II was determined as 2-Hydroxy-3-(9,12-(9E,12E)-Octadecadienoyloxy) propanoic acid.

**Key words** – *Polygonatum*, Chemical structure, Extracts

#### 서 론

황정(*Polygonatum sibiricum*)는 한방과 민간에서 자양(滋養) 및 강장(強壯)의 목적으로 많이 이용되어 왔으며, 병을 앓고 난 후 여러 가지 허약증상, 영양불량, 폐결핵으로 인한 기침, 당뇨병으로 인한 지갈(止渴) 등의 약재로도 사용되어 왔으며[5], 또한 황정에서 혈당강화 효과도 보고되고 있다[1-4,6-9].

#### 재료 및 방법

황정은 (주)산청식품에서 제공된 등굴레 40 kg (1회 줌)을 사용하였고, 분쇄기에서 잘게 부순 황정을 Fig. 1의 순서에 따라 화합물 II(hexane층에서 얻은 crude물질을 hexane : ethylacetate(9 : 1, v/v)로 사용하여 R<sub>f</sub> = 0.481에 나타난 물질)를 얻었다. 본 연구에서는 화합물 II의 화학적인 구조는 기초과학지원센터의 Bruker, 600MHz NMR

<sup>†</sup> Corresponding author

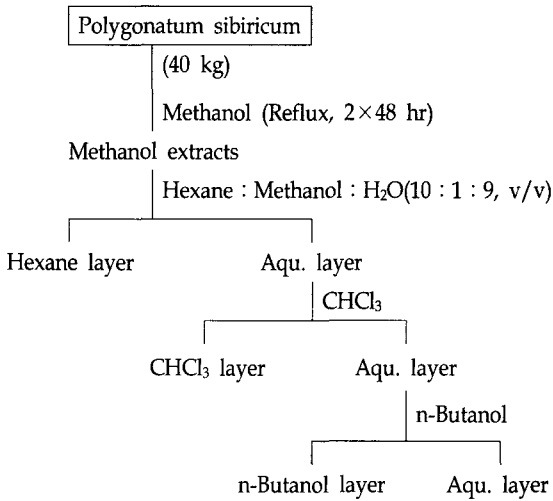


Fig. 1. Fractionation of methanolic extract from *Polygonatum sibiricum*

Spectrometer(reference로서 TMS를 이용하여  $CDCl_3$ 하에서)과 MS Spectrometer에 의해 결정하였다[9].

## 결과 및 고찰

황정(*Polygonatum sibiricum*)에서 분리한 화합물 II의 구조를  $^1H$ -nmr,  $^{13}C$ -nmr, DEPT 135, COSY, HMQC, HMBC 스펙트럼 및 MS 스펙트럼으로 확인하여, 화합물 II의 구조가 2-Hydroxy-3-(9,12-(9E,12E)-octadecadienoyloxy) propanoic acid임을 알 수 있었다. 화합물 II의 화학구조를 확인하는 단계는 다음과 같다.

### 1. $^1H$ -nmr 스펙트럼에 의한 구조분석

화합물 II의 구조는 1.3 ppm에서 긴 methylene ( $CH_2$ ) signal이 나타나고, 4.2 ppm의 signal은 electron withdrawing group이 있음을 알 수 있고, spin coupling (doublet, doublet, d,d)을 보아 주위에 CH가 있는 구조를 갖는다. 5.26 ppm의 작은 H-signal은 olefinic이거나, 더욱 강한 electron withdrawing group이 붙어있는 경우이다.

### 2. $^{13}C$ -nmr 스펙트럼에 의한 구조분석

$^{13}C$ -nmr 스펙트럼에서, 173 ppm에서 2개의 carbonyl

carbon으로 carboxylic acid 또는 ester나 amide의 carbon signal이고,  $^1H$ -nmr에서 예상되었듯이 130 ppm의 4개의 signal은 2개의 이중결합이 있음을 보여주며, 68.8 ppm과 62.0 ppm의 signal은 chemical shift로 보아 각각 5.26 ppm과 4.2 ppm의 H-signal에 전자를 끌어당기는 group이 붙어 있음을 알 수 있다. 그리고 24.5~34.1 ppm의 multiple signal 들은 긴 methylene carbon이 있음을 알 수 있다.

### 3. DEPT 스펙트럼에 의한 구조분석

탄소에 proton수를 확인하기 위해 DEPT 스펙트럼을 찍어서 확인하였으며, 즉 quaternary carbon (C), methyne (CH), methylene ( $CH_2$ ), 그리고 methane ( $CH_3$ )의 탄소 signal 들을 DEPT 135°에서,  $CH_3$ 와 CH의 carbon signal은 위(up)로,  $CH_2$  signal은 아래(down)로 나타난다. DEPT 135° 스펙트럼에서 보면, 177.9 ppm에서 quaternary carbon (C) signal은 나타나지 않으며, 14 ppm의 carbon signal은 terminal  $CH_3$ 로서 위(up)로 나타나 있는 것을 확인할 수 있으며, 한편, 130 ppm과 68.8 ppm에서는 methyne (CH)의 peak가 위 (up)로 나타나 있는 것을 확인할 수 있으며, 24.5~34.1 ppm과 62.0 ppm은 methylene ( $CH_2$ )의 peak들이 아래 (down)로 나타나 있는 것을 알 수 있다.

### 4. COSY 스펙트럼에 의한 구조분석

분자내의 proton과 proton간의 상호작용은 COSY spectrum(Fig. 2)으로 확인하였다. 5.35 ppm signal (a)은 2.78 ppm signal (d)과 사각형을 이루므로 5.35 ppm (a)에서 나타나는 H 원자들은 2.78 ppm (d)에서 나타나는 H 원자와 상호작용을 하고, 5.35 ppm (a)에서 나타나는 H 원자들은 2.05 ppm signal (f)과도 사각형을 이루므로 5.35 ppm (a)에서 나타나는 H 원자들은 2.05 ppm (f)에서 나타나는 H 원자들과 상호작용을 함을 알 수 있다. 그리고 5.26 ppm (b)와 4.2 ppm (c)의 signal이 사각형을 이루므로 5.26 ppm (b)에서 나타나는 H 원자들은 4.2 ppm (c)에서 나타나는 H 원자들과 상호작용을 하며 서로 인접한 수소원자임을 알 수 있다. 이러한 결과로 다음과 같은 화합물의 부분적인 구조를 나타낼 수 있다.

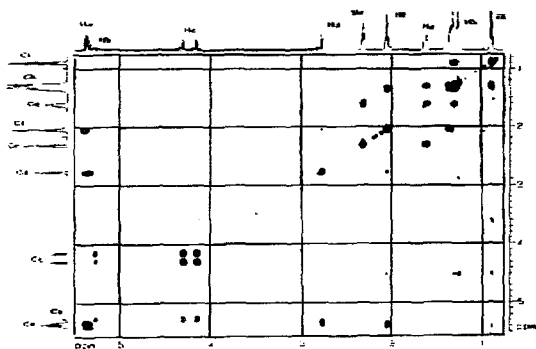
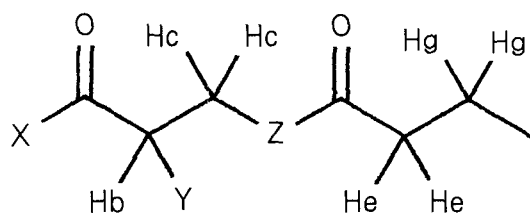
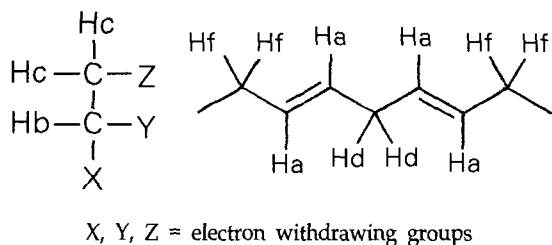
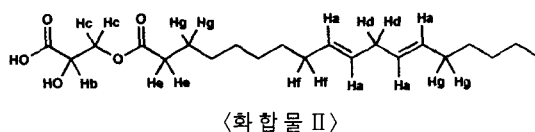


Fig. 2. COSY spectrum of compound II extracted from rhizomes of *P. sibiricum*.

$^{13}\text{C}$ , COSY 및 HMQC 스펙트럼으로 부분적인 구조를 알 수 있다. 그러므로 이 두 부분의 부분구조는 fatty acid로서 서로 연결되어짐을 HMBC로 확인할 수 있다.

그러므로, 이 두 부분의 부분적인 구조는 fatty acid로서 연결되어 있음을 HMBC로 확인 할 수 있으며, Mass data를 통해 지방산의 사슬의 숫자를 알 수 있으며, 화합물의 구조는 다음과 같이 2-hydroxy-3-(9,12-(9E,12E)-octadecadienoyloxy)propanoic acid임을 알 수 있다.



### 5. HMQC 스펙트럼에 의한 구조분석

$^1\text{H}$ -nmr과  $^{13}\text{C}$ -nmr, DEPT  $135^\circ$  스펙트럼을 통하여 확인할 수 있었던 것처럼, H의 5.35 ppm (a)은 C의 129 ppm (a)과 연결되어 있으며, H의 5.3 ppm (b)은 C의 68 ppm (b)과 연결되어 있으며, H의 4.15 ppm (c)은 C의 62 ppm (c)과 연결되어 있음을 알 수 있으며, 각각의 C-signal에 H-signal 번호를 붙여서 C (a), C (b), C (c), C (d), C (e), C (f), C (g), C (h), C (i)로 확인할 수 있다.

### 6. HMBC 스펙트럼에 의한 구조분석

H-spectrum의 5.26 ppm (b) signal과 4.2 ppm (c) signal이 172.8 ppm의 carbonyl carbon의 signal과 상호작용을 하고 있으며, 2.3 ppm (e)과 1.6 ppm (g)의 H-signal들도 173.2 ppm의 또 다른 carbonyl carbon signal과 상호작용을 하고 있음을 보여준다. 따라서 다음과 같은 구조임을 알 수 있다.

여기서 carbonyl carbon의 chemical shift (172.8 ppm, 173.2 ppm)로 보아 carboxylic acid와 ester일 것으로 생각된다(X=OH, Z=O). 나머지 부분은  $^1\text{H}$ -nmr,  $^{13}\text{C}$ -nmr, DEPT

### 요 약

본 연구에서는 황정(*Polygonatum sibiricum*) 추출물에서 생리활성 물질로 기대되는 새로운 화합물II를 분리하고, 분리한 화합물의 화학적인 구조를 분광학적인 방법에 의하여 확인하였다.  $^1\text{H}$ -nmr,  $^{13}\text{C}$ -nmr, DEPT135, COSY, HMQC, HMBC 스펙트럼 및 MS 스펙트럼으로 확인하여 화합물II의 구조가 2-hydroxy-3-(9,12-(9E,12E)-octadecadienoyloxy)propanoic acid임을 알 수 있었다.

### 감사의 글

본 연구는 1998년도 농림부에서 시행한 농림수산 현장 애로기술개발사업 연구결과의 일부로서 지원하여 주심에 감사드립니다.

### 참고 문헌

1. Akhtar, M. S., Ali, M. R. 1985. *Planta Medica*, 51, 81.
2. Akhtar, M. S., Kham, Q. M., Khaliq, T. *Planta Medica*

황정(黃精) 추출물의 화학구조 결정에 관한 연구(II)

- 1984, 50(2), 138-142.
3. Bailey, C. J., Day, C. *Diabetic Care* 1989, 12, 553.
  4. Bajpai, M. B., Asthana, R. K., Sharma, N. K., Chatterjee, S. K., Mukherjee, S. K. 1991. *Planta Medica*, 57, 102.
  5. Brill, S., Dean, E. *Hearst Books, New York, USA. Solomon's seal*. 1994, 261.
  6. Day, C., Cartwright, T., Provost, J., Bailey, C. J. 1990. *Planta Medica*, 56, 426.
  7. Iyorra, M. D., Paya, H. 1988. *Planta Medica*, 55(4), 282.
  8. Villarm, A., Paya, H., Hortiguela, M. D., Corte, D. *Planta Medica* 1986, 52(1), 43.
  9. Yoon, J. H., Park, J. H., Kim, J. J., Kwon, K. R., Ahn, C., Kang, J. H., Shin, D. S. 1999, *Gene and Protein*, 2, 99-107.