

## 배추(*Brassica campestris* ssp *pekinensis*) 지상부의 화학성분

최연희 · 김정숙 · 서지희 · 이정원 · 김영섭 · 유시용 · 이강노<sup>1</sup> · 김영균<sup>2</sup> · 김성훈<sup>3\*</sup>  
한국화학연구원, <sup>1</sup>성균관대학교 약학대학, <sup>2</sup>국민대학교 삼림과학대학, <sup>3</sup>경희대학교 동서의학대학원

## Chemical Constituents of *Brassica campestris* ssp *pekinensis*

Yeon Hee Choi, Jung Sook Kim, Jee Hee Seo, Jung Won Lee, Young Sup Kim,  
Shi Yong Ryu, Kang Ro Lee<sup>1</sup>, Young Kyoon Kim<sup>2</sup>, and Sung-Hoon Kim<sup>3\*</sup>

Korea Research Institute of Chemical Technology, Daejeon 305-606, Korea

<sup>1</sup>College of Pharmacy, Sungkyunkwan University, Suwon 440-746, Korea

<sup>2</sup>College of Forest Science, Kookmin University, Seoul 136-702, Korea

<sup>3</sup>Graduate School of East-West Medical Science, Kyunghee University, Yongin 449-701, Korea

**Abstract** – Chinese cabbage (*Brassica campestris* ssp *pekinensis*) is one of the most popular green vegetables in Cruciferae family, which consisted in many Korean food. All kinds of Chinese cabbage are used both fresh and cooked with certain varieties being more suitable than others for some uses. A unique dish, Kimchi, has been developed in Korea and elsewhere by fermenting Chinese cabbage and pickling it in salt solution. Though lots of beneficial effect of Kimchi on human health has been published before, it is still debatable and in vague on the active origin of the Kimchi or of the Chinese cabbage responsible for the corresponding biological activities. We have recently conducted phytochemical investigation of the Chinese cabbage, which is the main ingredient of the Korean traditional food, Kimchi. The MeOH extract of Chinese cabbage was partitioned with ethylacetate and BuOH, successively. The ethyl acetate soluble part was subjected to column chromatography with silica gel and RP-18, which gave finally five minor components, i.e.,  $\beta$ -sitosterol (1), indole-3-acetonitrile (2), 4-methoxyindole-3-acetonitrile (3), methyl ferulate (4), glycerol 1-(9,12,15-octadecatrienoate) (5). The structures of them were established on the basis of spectral (<sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR) evidences.

**Key words** –  $\beta$ -sitosterol, indole-3-acetonitrile, 4-methoxy-indole-3-acetonitrile, *Brassica campestris*, glucosinolate

배추(*Brassica campestris* L. ssp *pekinensis* [Lour.] Rupr.)는 십자화과(Cruciferae)에 속하는 두해살이풀로써, 영어명은 Chinese cabbage 또는 Celery cabbage, 중국명은 菜, 白菜, 大白菜로, 우리나라에서는 송, 송채, 백송, 백채, 배추, 배차, 배채 등으로 불리우고 있다.<sup>1)</sup>

원산지는 중국 북부지방이나 그 기원은 지중해 연안에 자생하는 잡초성의 유채(油菜)라고 전해지고 있다. 지중해, 중앙 아시아 지역을 거쳐서 중국에 전파되었고 그 후 7세기경 중국 북부지방에서 재배되고 있던 순무(*Brassica campestris* L. ssp *rapa* Metzg : 蔓菁)와 남부지방에서 재배되고 있던 송(某)이 자연 교잡되어 배추의 원시형이 나타났고 이후 16세기에 반결구배추, 18세기에 결구배추로 발전되어왔다. 우리나라에서는 13세기경 <향약구급방(鄕藥救急方)>에 배추와 관

련된 문자인 송(某)이 처음으로 등장하는데 당시에는 채소가 아닌 약초로 이용되었다고 한다. 현재 세계적인 분포를 보면 중국, 한국, 일본 등 동양 3국에서 중요한 채소로 재배되고 있다. 성분은 97% 이상이 수분으로 구성되어 있고, 칼슘과 비타민, 특히 푸른 잎에 비타민 C가 많이 함유되어 있다.<sup>1,2)</sup>

특히 한국인의 식생활에 있어서 배추, 무우, 고추 등 채소류의 위치는 매우 중요하게 인식되고 있으며 그 중에서도 배추는 전체 채소류 소비량의 1위를 차지하고 있다. 실제로 배추는 대표적인 한국인의 식단을 구성하는 각종 김치의 원료로 대부분이 사용되고 있다. 한편, 이와같이 배추가 우리 식단에서 빼어놓을 수 없는 가장 주요한 재료로 사용되고 있음에도 불구하고 배추의 화학성분에 대한 연구는 매우 미진한 실정이다. 본 연구진은 배추 및 배추와 동일한 기원을 갖고 있는 순무, 유채 등의 식물에 함유된 화학성분의 차이를 규명하여 보고자 우선 배추의 지용성 성분군에 대한 성분연구를 수행하였다.

\*교신저자(E-mail) : sungkim7@khu.ac.kr  
(FAX) : 031-205-1074

## 재료 및 방법

**시약 및 기기** - 본 연구에 사용된 시약은 모두 특급(GR) 및 1급(EP)급 시약을 사용하였으며 지방산표준품은 Aldrich 사로부터 구입하였다. 용점은 Haakebuchler 미량용점 측정기를 이용하여 측정하였으며 측정치는 따로 보정하지 아니하였다. 선광도  $[\alpha]_D$ 는 JASCO DIP-4 digital polarimeter를, Low resolution MS (70 eV)는 JEOL사의 JMS-DX 303 mass spectrometer, 각종 proton 및 carbon NMR spectra는 Bruker의 AM-300 및 AMX-500을 이용하여 측정하였다. Column chromatography는 silica gel (70–230 mesh, Merck), Lichroprep RP-18 (40–63u, Merck)를 사용하였으며 preparative TLC는 Kiesel gel 60 F plate (0.5 mm, Merck)를 사용하였다.

**실험재료** - 실험에 사용된 배추은 대전광역시 소재 청과물시장에서 구입하여 일주일간 음건시킨 후 실험에 사용하였으며 voucher specimen은 한국화학연구원에 보관되어 있다.

**추출 및 분리** - 뿌리부분을 제거한 습중량 60 kg의 배추를 일주일 간 음건한 후 건조 시료를 5일 동안 MeOH에 냉침시켰다. 냉침액을 감압농축하여 조 MeOH 엑스 549 g을 얻었다.

이 MeOH 엑스를 10 L의 증류수에 현탁시킨 후 분액여두에서 동량의 EtOAc로 수차례 추출하여 EtOAc 가용분획 16.7 g을 얻었다. 잔류 수층은 BuOH로 추출하여 BuOH 가용분획 21.8 g을 얻었다.

이 중 EtOAc 가용분획 14 g을 취하여 *n*-hex/EtOAc =4:1, 3:1, 2:1, 1:1, EtOAc, 50% CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> in MeOH의 용출용매 순으로 silica gel (70–230 mesh, 750 g) column ( $\varnothing$ =5.0×100 cm) chromatography를 실시하여 Fr.1 (1.1 g), Fr.2 (1.8 g), Fr.3 (1.7 g), Fr.4 (2.8 g) 및 Fr.5 (5.8 g)으로 분획하였다. 그 중 Fr.2 (1.8 g)은 MeOH에 녹여 방치한 결과 120 mg의 무색 침상 결정이 석출되었다(**compound 1**). 한편, Fr.3 (1.7 g)은 재차 silica gel column chromatography (용출용매; CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> in MeOH 100:1, 50:1, 10:1, 1:1)를 실시하여 Fr.31 (80 mg), Fr.32 (40 mg), Fr.33 (480 mg), Fr.34 (580 mg) 및 Fr.35 (500 mg)으로 분획하였다. 이중 Fr.31을 *n*-hex/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> =1:1 용매조건으로 silica gel column chromatography를 실시하여 Fr.311 (37 mg)과 Fr.312 (41 mg)으로 나누었으며 Fr.312를 다시 40% MeOH을 용출용매로 하여 RP-18 column chromatography를 실시하여 **compound 2** (14 mg)과 **compound 3** (13 mg)을 각각 분리하였다.

Fr.32 (40 mg)를 50% MeOH을 용출용매로 하여 RP-18 column chromatography를 실시하고 Preparative TLC (MC:MeOH = 50:1)로 거듭 정제한 결과 **compound 4** 7 mg

을 분리하였다. Fr.34 (580 mg)를 RP-18 column chromatography를 실시하여 (용출용매 50%, 60%, 70%, 80%, 100% MeOH) 190 mg의 oil상 물질 **compound 5**를 분리하였다.

**Compound 1** - 무색 침상 결정 (MeOH), mp. 140°C, C<sub>29</sub>H<sub>50</sub>O, EIMS *m/z*; M<sup>+</sup>: 414.72,  $[\alpha]_D = -37^\circ$  (c 0.1 CHCl<sub>3</sub>), <sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>) :  $\delta$  5.32 (1H, m, H-6), 3.49 (1H, m, H-3), 0.98 (3H, s, H-19), 0.89 (3H, d, *J* = 6.5 Hz, H-21), 0.64 (3H, s, H-18). <sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CDCl<sub>3</sub>) :  $\delta$  11.8 (C-29), 11.9 (C-18), 18.8 (C-21), 19.0 (C-27), 19.4 (C-19), 19.8 (C-26), 21.1 (C-11), 23.0 (C-28), 24.3 (C-15), 26.3 (C-23), 28.2 (C-16), 29.1 (C-25), 31.6 (C-2), 31.8 (C-8), 31.9 (C-7), 33.9 (C-22), 36.1 (C-20), 36.5 (C-10), 37.2 (C-1), 39.7 (C-12), 42.3 (C-4), 45.8 (C-13), 50.1 (C-24), 56.0 (C-9), 56.1 (C-17), 56.7 (C-14), 71.8 (C-3), 121.7 (C-6), 140.7 (C-5)

**Compound 2** - White powder, mp 37°C, C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>, <sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>) :  $\delta$  8.35 (1H, brs, NH), 7.52 (1H, d, *J* = 7.9 Hz), 7.38 (1H, d, *J* = 7.9 Hz), 7.15 (2H, m, H-5,6), 7.12 (1H, s, H-2), 3.78 (2H, s, H-10). <sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CDCl<sub>3</sub>) :  $\delta$  14.4 (C-10), 104.8 (C-3), 111.5, 118.1 (CN), 120.3 (×2), 122.9, 123.2, 125.9 (C-9), 136.3 (C-8)

**Compound 3** - colorless oil, C<sub>11</sub>H<sub>10</sub>N<sub>2</sub>O, <sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>) :  $\delta$  8.09 (1H, brs, NH), 7.04 (1H, m, H-6), 7.00 (1H, s, H-2), 6.88 (1H, d, *J* = 8.0 Hz, H-7), 6.43 (1H, d, *J* = 8.0 Hz, H-5), 3.97 (2H, s, H-10), 3.83 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>), <sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CDCl<sub>3</sub>) :  $\delta$  16.0 (C-10), 55.2 (-OCH<sub>3</sub>), 99.9 (C-7), 104.7, 105.3 (C-3), 116.3, 119.2 (CN), 121.3, 123.7, 137.9 (C-8), 154.4 (C-4)

**Compound 4** - mp. 63°C, C<sub>11</sub>H<sub>12</sub>O<sub>4</sub>, <sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>) :  $\delta$  7.55 (1H, d, *J* = 15.9 Hz, H-7), 7.19 (1H, d, *J* = 2.4 Hz, H-2), 6.99 (1H, dd, *J* = 8.1, 2.4 Hz, H-6), 6.84 (1H, d, *J* = 8.1 Hz, H-5), 6.22 (1H, d, *J* = 15.9 Hz, H-8), 3.86 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>), 3.72 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>)

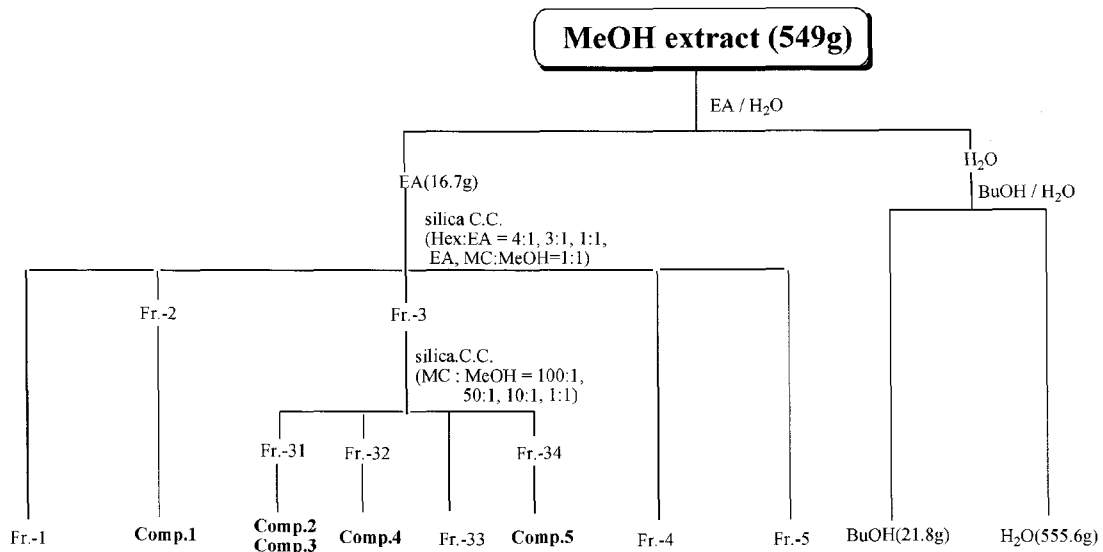
**Compound 5** - colorless oil, C<sub>21</sub>H<sub>36</sub>O<sub>4</sub>, <sup>1</sup>H-NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>) :  $\delta$  0.99 (3H, t, H-18'), 1.33 (8H, m), 1.65 (2H, m, H-3'), 2.09 (4H, m, H-8',17'), 2.36 (2H, t, H-2'), 2.82 (4H, m, H-11',14'), 3.68 (2H, m, H-3), 3.95 (1H, m, H-2), 4.19 (2H, m, H-1), 5.38 (6H, m, H-9',10',12',13',15',16'), <sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CDCl<sub>3</sub>) :  $\delta$  14.2 (C-18'), 20.5 (C-17'), 24.8, 25.5, 25.6, 27.2, 29.0 (×2), 29.1, 29.5, 34.1, 63.6 (C-1), 65.1 (C-3), 70.2 (C-2), 127.1, 127.7, 128.2, 128.3, 130.2, 131.9, 174.3 (C=O)

**결과 및 고찰**

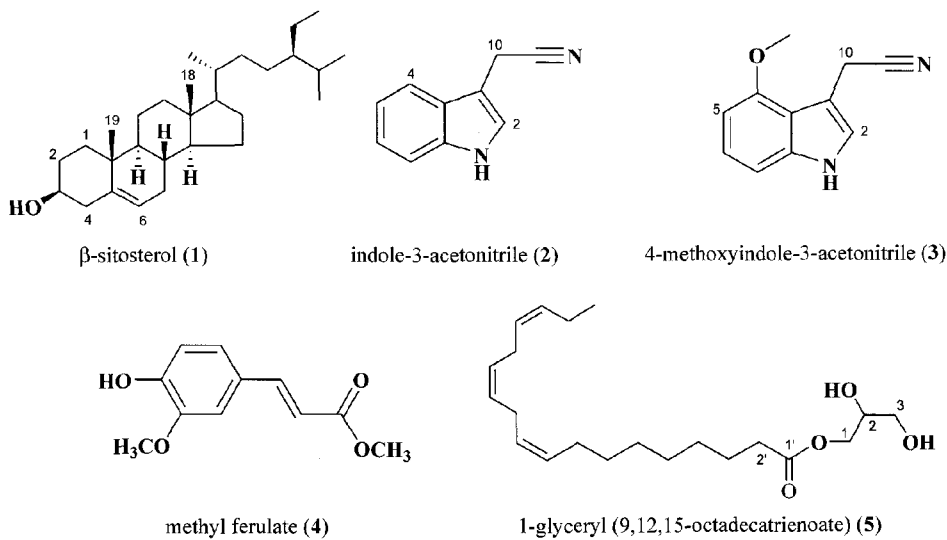
십자화과 식물 배추(*Brassica campestris* L. ssp *pekinensis*)의 지상부(60 Kg)를 음건 후 MeOH로 5일간 추출한 결과 MeOH 추출물(549 g)의 양은 원시료의 습중량 대비 1% 미만이었다. 또, 이 MeOH 추출물을 상법에 따라 증류수에 현탁시킨 후 EtOAc, BuOH 순으로 용매분획하여 본 결과 원시료 습중량 대비 0.03%의 EtOAc 가용분획(16.7 g)과 원시료 습중량 대비 0.04%의 BuOH 가용분획(21.8 g)을 얻을 수 있었다. 따라서 배추 지상부의 MeOH 추출물 중 90% 이상은 수층에 진류되고 있으며 유기용매에 이행되는 지용성 성분군은 원시료 중량 대비 0.1% 미만으로 극히 소량만이 존

재함을 알 수 있었다. 이 지용성 성분군 즉 EtOAc 가용분획을 silica gel column chromatography와 RP-18 column chromatography를 반복적으로 실시하여 정제한 결과 1종의 steroid (1), 2종의 indole계 시안화합물(2, 3), 1종의 cinnamic acid 유도체 (4) 및 1종의 지방산 유도체(5) 등 5종의 화합물을 분리하였다(Scheme 1). 이들 화합물들은 각각의 물리화학적 성상, <sup>1</sup>H-NMR 및 <sup>13</sup>C-NMR spectral data를 종합 검토하고 표품과 비교하여 본 결과 각각 β-sitosterol (1)<sup>1,2)</sup>, indole-3-acetonitrile (2), 4-methoxyindole-3-acetonitrile (3)<sup>3-5)</sup>, methyl ferulate (4),<sup>6-9)</sup> glycerol 1-(9,12,15-octadecatrienoate) (5)로 동정되었다.<sup>10,11)</sup> (Fig. 1)

이 중 β-sitosterol (1)은 배추를 비롯한 십자화과 식물 및



**Scheme 1** Isolation of compound 1~5 from the MeOH extract of *B. campestris*.



**Fig. 1.** Structure of compound 1~5 isolated from the extract of *B. campestris*.

여러 초본 식물에 광범위하게 존재하는 대표적인 steroid 화합물로서 식물성장에 필수적으로 요구되는 성분인 동시에 항암활성 등이 보고되고 있으며<sup>11-14)</sup> indole-3-acetonitrile (2) 및 4-methoxyindole-3-acetonitrile (3)는 배추 및 십자화과 채소류에 널리 함유된 유기황배당체 화합물 (glucosinolate)의 분해산물로서 glucosinolate가 추출 도중 유기용매에 의하여 혹은 식물세포에 존재하는 효소인 myrosinase의 작용에 의하여 분해된 nitrile 산물로서 식물성장 호르몬으로 작용한다고 알려져 있다.<sup>15)</sup>

또한 4-hydroxy-3-methoxycinnamic acid methylester (methyl ferulate 4)는 sinapic acid methylester 와 함께 십자화과 식물에 널리 분포하는 phenolic acid계 성분으로서 항암활성, 항산화작용, 소염작용 등 다양한 생리활성을 나타내는 성분으로 알려져 있다.<sup>16)</sup> 한편, 1-glycerol (9,12,15-octadecatrienoate) (5)는 glycerol 에 1분자의 linolenic acid가 결합한 화합물로서 십자화과 식물 및 여러 식물에서 분리 보고되고 있으며 특히 배추에서는 지방산 중 linolenic acid가 풍부하게 함유되어 있다고 보고되고 있다.<sup>17)</sup>

한편 MeOH 추출물 중 유기용매분획으로 이행되지 않고 최종수층으로 잔류되는 분획에 대하여는 별도로 성분연구를 시행하여 본 결과 대부분이 2당류(maltose), 과당류 및 다당류 등 탄소화물 군으로 구성되고 있음을 알 수 있었다.

## 사 사

본 연구는 농촌진흥청의 바이오그린21 연구사업의 연구비지원에 의해 수행되었으며 이에 감사를 드립니다.

## 인용문헌

- Lee C. H. (1986) Kimchi; korean fermented vegetable foods. *korean J. Dietary Culture* **1**(4): 395-402.
- Cheigh H. S., Park K. Y. (1994) Biochemical, morphological, and nutritional aspects of kimchi(korean fermented vegetable products). *Critical Reviews in Food Science and Nutrition* **34**(2): 175-203.
- Marina D. G., Pietro M., and Lucio P. (1990) Stigmasterols from *Typha latifolia*. *J. Nat. Prod.* **53**(6): 1430-1435.
- Li X. Q., Kun G., Jia Z. J. (2003) Eremophilanolides and Other Constituents from the Roots of *Ligularia sagitta*. *Planta Med.* **69**(4): 356-360.
- Aldrich Library of <sup>13</sup>C and <sup>1</sup>H FT NMR Spectra, 3, 136A, 136B, 153C.
- Chowdhury B. K. and Chakraborty D. P. (1971) 3-formylindole from *Murraya exotica*. *Phytochemistry* **10**: 481-483.
- Kenji M., Mitsuo T., Akira S. (1995) Three sulphur-containing stress metabolites from Japanese radish. *Phytochemistry* **39**: 581-586.
- Harrison L. J., Sia G. L., Sim K. Y., Tan H. T., Connolly J. D., Lavaud C., Massiot G. (1995) A ferulic acid ester of sucrose and other constituents of *Bhesa paniculata*. *Phytochemistry* **38**(6): 1497-1500.
- Wu T. S., Leu Y. L., Tsai Y. L., Lin F. W., Chan Y. Y. and Chiang C. Y. (2001) The constituents of *Aristolochia elegans* and *Aristolochia zollingeriana*. *J. Chin. Chem. Soc.* **48**(1): 109-112.
- Dias C., Dias M., Borges C., Almoester Ferreira M. A., Paulo A., Nascimento J. (2003) Structural elucidation of natural 2-hydroxy di- and tricarboxylic acids and esters, phenylpropanoid esters and a flavonoid from *Autonoë madeirensis* using gas chromatographic/electron ionization, electrospray ionization and tandem mass spectrometric techniques. *J. Mass Spectrometry* **38**(12): 1240-1244.
- Stobiecki M., Buko M., Marczak U., Bednarek P., Pilewska M., Wojtaszek P. The complexity of oxidative cross-linking of phenylpropanoids - evidence from an *in vitro* model system. *Functional Plant Biology* **29**(7): 853-864.
- Lee, H. S., Cho H. J., and Kim B. D. (1995) Enhancement of Shoot Regeneration by Ethylene Inhibitors from Cotyledon Explant of *Brassica campestris* L. ssp. *pekinensis*. *Kor. J. Plant Tissue Culture* **22**(5): 267-271.
- Kwak J. M., Kim S. A., Hong S. W., Nam H. G. (1997) Evaluation of 515 expressed sequence tags obtained from guard cells of *Brassica campestris*. *Planta* **202**(1): 9-17.
- Iwatsuki K, Akihisa T, Tokuda H, Ukiya M, Higashihara H, Mukainaka T, Iizuka M, Hayashi Y, Kimura Y, Nishino H. (2003) Sterol ferulates, sterols, and 5-alk(en)ylresorcinols from wheat, rye, and corn bran oils and their inhibitory effects on Epstein-Barr virus activation. *J Agric Food Chem.* **51**(23): 6683-6688.
- Loub W. D., Wattenberg L. W., Davis D. W. (1975) Aryl hydrocarbon hydroxylase induction in rat tissues by naturally occurring indoles of cruciferous plants. *J Natl Cancer Inst.* **54**(4): 985-988.
- Stagos D., Kouris S., Kouretas D. (2004) Plant phenolics protect from bleomycin-induced oxidative stress and mutagenicity in *Salmonella typhimurium* TA102. *Anticancer Res* **24** : 743-745.
- Ahuja K. L., Batta S. K., Raheja R. K., Labana K. S., Gupta M. L. (1989) Oil content and fatty acid composition of promising Indian *Brassica campestris* L. (Toria) genotypes. *Plant Foods Hum Nutr.* **39**(2): 155-160.

(2004년 8월 20일 접수)