



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년05월16일  
(11) 등록번호 10-1858903  
(24) 등록일자 2018년05월10일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
G01N 33/02 (2006.01) G01N 30/12 (2006.01)  
G01N 30/72 (2006.01)  
(52) CPC특허분류  
G01N 33/025 (2013.01)  
G01N 30/7206 (2013.01)  
(21) 출원번호 10-2017-0083318  
(22) 출원일자 2017년06월30일  
심사청구일자 2017년06월30일  
(56) 선행기술조사문헌  
US20020119513 A1  
Development of a SPME-GC-MS method for  
spoilage detection in case of plums  
inoculated with *Penicillium expansum* (Acta  
Alimentaria, 2011, 40(Suppl.18), pp 188-197)  
Regeneration of volatile compounds in Fuji  
apples following ultra low oxygen atmosphere  
storage and its effect on sensory  
acceptability(2008)

(73) 특허권자  
송실대학교산학협력단  
서울특별시 동작구 상도로 369 (상도동)  
이화여자대학교 산학협력단  
서울특별시 서대문구 이화여대길 52 (대현동, 이  
화여자대학교)  
(72) 발명자  
서정아  
서울특별시 서초구 서운로9길 18, 101동 605호 (서  
초동, 자연인아파트)  
김영석  
경기도 고양시 일산동구 위시티4로 46, 208동  
1801호  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
특허법인태백

기술이전 희망 : 기술양도

전체 청구항 수 : 총 11 항

심사관 : 기광용

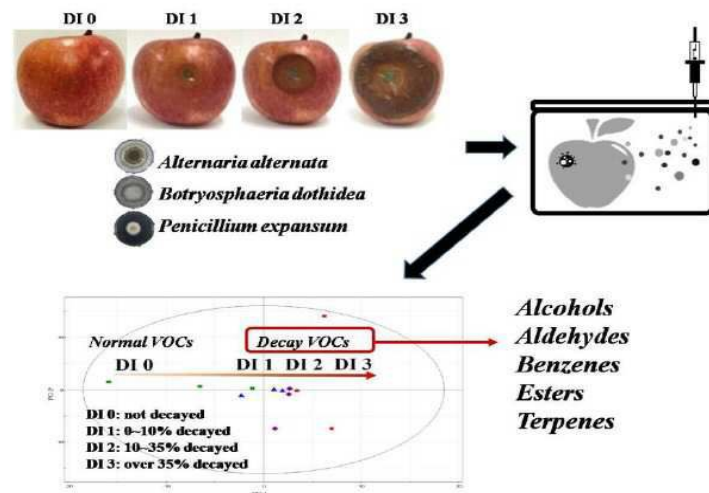
(54) 발명의 명칭 사과 부패 곰팡이 유래 휘발성 화합물을 포함하는 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물

(57) 요약

본 발명은 사과 부패 곰팡이 유래 휘발성 화합물을 포함하는 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물에 관한 것으로서, 부패한 부사로부터 분리한 3가지의 부패균 보트리오스페리아 도치데아(*Botryosphaeria dothidea*), 페니실리움 엑스판섬(*Penicillium expansum*), 알테르나리아 알테르나타(*Alternaria alternata*)를 사과에 인공 접종하여

(뒷면에 계속)

대표도 - 도3



온도  $25 \pm 1^\circ\text{C}$ , 상대 습도  $90 \pm 2\%$ 에서 보관하면서 접종하기 전과 접종 후 10% 미만으로 부패한 상태, 10~35% 부패한 상태, 35% 이상 부패한 상태의 단계에 맞춰 휘발성 성분을 분석하였다. 또한, 주요 부패 균주들 각각의 부패되면서 차별적으로 증가, 생성되는 휘발성 성분들을 분석하였다. 부패한 부사로부터 분리한 부패 원인균에 따른 사과 부패지수별 냄새 마커를 발굴하고, 냄새 DB를 구축하여 각 정보의 상관성 분석을 통하여 농산물 수확 후 관리시 부패에 의한 경제적 손실 및 다양한 농수축산식품의 부패 방지로 경제적 손실 저감에 기여할 것으로 예상된다.

(52) CPC특허분류

G01N 2030/128 (2013.01)

G01N 2030/884 (2013.01)

(72) 발명자

**김민주**

서울특별시 구로구 개봉로20길 6, 104동 1403호 (개봉동, 현대아파트)

**이상미**

서울특별시 강남구 선릉로126길 22, 111동 203호 (삼성동, 롯데캐슬프리미어아파트)

**김성미**

경기도 안양시 만안구 경수대로 1193, 114동 303호

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 315043-3

부처명 농림축산식품부

연구관리전문기관 농림수산물기술기획평가원

연구사업명 수출전략기술개발사업

연구과제명 수출용 신선 농식품 고품질화를 위한 냄새지문 활용 부패감지기 개발

기 여 율 1/1

주관기관 숭실대학교 산학협력단

연구기간 2015.08.14 ~ 2018.08.13

공지예외적용 : 있음

## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

(E)-헥스-3-에닐 아세테이트((E)-hex-3-enyl acetate), 1-메틸-4-프로판-2-일벤젠(1-Methyl-4-propan-2-ylbenzene), 2-(2-에톡시에톡시)에탄올(2-(2-Ethoxyethoxy)ethanol), 메틸 벤조에이트(Methyl benzoate), 1-메틸-4-프로프-1-엔-2-일벤젠(1-Methyl-4-prop-1-en-2-ylbenzene), 아세트알데하이드(Acetaldehyde), 2-메틸프로판-1-올(2-Methylpropan-1-ol), 프로판-1-올(Propan-1-ol), 3-헥센-1-올(3-Hexen-1-ol), 2-메틸프로프-2-에날(2-Methylprop-2-enal), 펜탄-3-원(Pentan-3-one), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,3-디엔(1-Methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,3-diene), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,4-디엔(1-methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,4-diene), 2-펜틸퓨란(2-Pentylfuran), (E)-헥스-2-에날((E)-Hex-2-enal), 메틸 헵타노에이트(Methyl heptanoate), 에틸 데카노에이트(Ethyl decanoate), 에틸 2-페닐아세테이트(Ethyl 2-phenylacetate), 디에틸 카보네이트(Diethyl carbonate), 프로필 옥타노에이트(Propyl octanoate), 1-옥텐-3-올(1-Octen-3-ol), 3-옥타논(3-Octanone), 페닐메탄올(Phenylmethanol), 2-에틸헥산-1-올(2-Ethylhexan-1-ol), 아세토페논(Acetophenone), 에틸 (E)-2-메틸부트-2-에노에이트(Ethyl (E)-2-methylbut-2-enoate) 및 3-메틸부타날(3-Methylbutanal)로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물을 유효성분으로 포함하는 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물.

#### 청구항 2

제1항에 있어서, 상기 사과 부패는 보트리오스페리아 도치데아(*Botryosphaeria dothidea*), 페니실리움 익스판섬(*Penicillium expansum*) 및 알테르나리아 알테르나타(*Alternaria alternata*)로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 균주에 의해 부패되는 것을 특징으로 하는 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물.

#### 청구항 3

제1항에 있어서, (E)-헥스-3-에닐 아세테이트((E)-hex-3-enyl acetate), 1-메틸-4-프로판-2-일벤젠(1-Methyl-4-propan-2-ylbenzene), 1-메틸-4-프로프-1-엔-2-일벤젠(1-Methyl-4-prop-1-en-2-ylbenzene), 2-메틸프로판-1-올(2-Methylpropan-1-ol), 프로판-1-올(Propan-1-ol), 3-헥센-1-올(3-Hexen-1-ol), 2-메틸프로프-2-에날(2-Methylprop-2-enal), 펜탄-3-원(Pentan-3-one), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,3-디엔(1-Methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,3-diene) 및 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,4-디엔(1-methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,4-diene)으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물을 유효성분으로 포함하는 보트리오스페리아 도치데아(*Botryosphaeria dothidea*)에 의한 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물.

#### 청구항 4

제1항에 있어서, (E)-헥스-2-에날((E)-Hex-2-enal), 메틸 헵타노에이트(Methyl heptanoate), 에틸 데카노에이트(Ethyl decanoate), 에틸 2-페닐아세테이트(Ethyl 2-phenylacetate), 디에틸 카보네이트(Diethyl carbonate), 프로필 옥타노에이트(Propyl octanoate), 1-옥텐-3-올(1-Octen-3-ol) 및 3-옥타논(3-Octanone)으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물을 유효성분으로 포함하는 페니실리움 익스판섬(*Penicillium expansum*)에 의한 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물.

#### 청구항 5

제1항에 있어서, 페닐메탄올(Phenylmethanol), 2-에틸헥산-1-올(2-Ethylhexan-1-ol) 및 아세토페논(Acetophenone)으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물을 유효성분으로 포함하는 알테르나리아 알테르나타(*Alternaria alternata*)에 의한 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물.

#### 청구항 6

제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 사과는 부사(Fuji)인 것을 특징으로 하는 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물.

## 청구항 7

사과 샘플로부터 (E)-헥스-3-에닐 아세테이트((E)-hex-3-enyl acetate), 1-메틸-4-프로판-2-일벤젠(1-Methyl-4-propan-2-ylbenzene), 2-(2-에톡시에톡시)에탄올(2-(2-Ethoxyethoxy)ethanol), 메틸 벤조에이트(Methyl benzoate), 1-메틸-4-프로프-1-엔-2-일벤젠(1-Methyl-4-prop-1-en-2-ylbenzene), 아세트알데하이드(Acetaldehyde), 2-메틸프로판-1-올(2-Methylpropan-1-ol), 프로판-1-올(Propan-1-ol), 3-헥센-1-올(3-Hexen-1-ol), 2-메틸프로프-2-에날(2-Methylprop-2-enal), 펜탄-3-원(Pentan-3-one), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,3-디엔(1-Methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,3-diene), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,4-디엔(1-methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,4-diene), 2-펜틸퓨란(2-Pentylfuran), (E)-헥스-2-에날((E)-Hex-2-enal), 메틸 헵타노에이트(Methyl heptanoate), 에틸 데카노에이트(Ethyl decanoate), 에틸 2-페닐아세테이트(Ethyl 2-phenylacetate), 디에틸 카보네이트(Diethyl carbonate), 프로필 옥타노에이트(Propyl octanoate), 1-옥텐-3-올(1-Octen-3-ol), 3-옥타논(3-Octanone), 페닐메탄올(Phenylmethanol), 2-에틸헥산-1-올(2-Ethylhexan-1-ol), 아세토페논(Acetophenone), 에틸 (E)-2-메틸부트-2-에노에이트(Ethyl (E)-2-methylbut-2-enoate) 및 3-메틸부타날(3-Methylbutanal)로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물을 검출하는 단계를 포함하는 사과 부패 감지 방법.

## 청구항 8

제7항에 있어서, 사과 샘플로부터 (E)-헥스-3-에닐 아세테이트((E)-hex-3-enyl acetate), 1-메틸-4-프로판-2-일벤젠(1-Methyl-4-propan-2-ylbenzene), 1-메틸-4-프로프-1-엔-2-일벤젠(1-Methyl-4-prop-1-en-2-ylbenzene), 2-메틸프로판-1-올(2-Methylpropan-1-ol), 프로판-1-올(Propan-1-ol), 3-헥센-1-올(3-Hexen-1-ol), 2-메틸프로프-2-에날(2-Methylprop-2-enal), 펜탄-3-원(Pentan-3-one), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,3-디엔(1-Methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,3-diene) 및 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,4-디엔(1-methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,4-diene)으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물 검출시, 보트리오스페리아 도치테아(*Botryosphaeria dothidea*)에 의한 사과 부패라고 판단하는 단계를 포함하는 사과 부패 감지 방법.

## 청구항 9

제7항에 있어서, 사과 샘플로부터 (E)-헥스-2-에날((E)-Hex-2-enal), 메틸 헵타노에이트(Methyl heptanoate), 에틸 데카노에이트(Ethyl decanoate), 에틸 2-페닐아세테이트(Ethyl 2-phenylacetate), 디에틸 카보네이트(Diethyl carbonate), 프로필 옥타노에이트(Propyl octanoate), 1-옥텐-3-올(1-Octen-3-ol) 및 3-옥타논(3-Octanone)으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물 검출시, 페니실리움 익스판섬(*Penicillium expansum*)에 의한 사과 부패라고 판단하는 단계를 포함하는 사과 부패 감지 방법.

## 청구항 10

제7항에 있어서, 사과 샘플로부터 페닐메탄올(Phenylmethanol), 2-에틸헥산-1-올(2-Ethylhexan-1-ol) 및 아세토페논(Acetophenone)으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물 검출시, 알테르나리아 알테르나타(*Alternaria alternata*)에 의한 사과 부패라고 판단하는 단계를 포함하는 사과 부패 감지 방법.

## 청구항 11

제7항 내지 제10항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 사과는 부사(Fuji)인 것을 특징으로 하는 사과 부패 감지 방법.

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001] 본 발명은 사과 부패 곰팡이 유래 휘발성 화합물을 포함하는 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002] 수확 후 저장 기간 동안의 품질을 개선하기 위해서, 많은 과일들은 최적의 시기 전에 상업적으로 수확되고

있다. 하지만, 저장 기간 동안 조직감이 손상되는 등 과일의 특성이 변할 수 있으며, 특히 저온 저장 기간 동안에는 질감이 약해지거나 퍼석거림을 야기될 수 있다. 과일의 향은 복합적으로 섞인 휘발성 화합물에 의해 결정되며, 이는 종종 과일의 품질을 결정하는 중요한 인자로 여겨지기도 한다. 이에, 수확 후 저장 기간 동안 적절한 향기 프로파일을 유지하는 것은 농업에 있어 가장 중요한 이슈 중 하나이다. 여러 연구 결과, 사과에는 350개 이상의 휘발성 성분을 포함하고 있는 것으로 밝혀졌는데, 특히 에스테르가 가장 많은 것으로 알려졌다. 사과에 의해 방출되는 휘발성 화합물은 수확 및 성숙 시기에 따라 영향을 받고, 과일 숙성 기간 동안 빠르게 변화한다. 특히, 특정 알코올 및 에스테르는 수확 시기에 따라 상당히 달라진다. 수확 후 손실의 대부분은 저장 기간 동안의 질병으로 인한 것이다. 병든 과일의 저장은 휘발성 유기 화합물(volatile organic compounds; VOCs)에 변화를 보이는데, 보통 악취를 발생시켜 가치를 떨어뜨린다. 저장 시 질병은 주로 병원성 곰팡이에 의해 발생하는데, 이는 식물성 바이오매스 분해에 중요한 역할을 한다. 카보하이드레이트-가수분해 효소를 생산하여, 곰팡이는 식물세포벽 뿐만 아니라 셀룰로오스 및 펙틴과 같은 식물 다당류를 분해할 수 있다. 또한, 곰팡이는 VOCs 형태의 1차 및 2차 대사체를 생산한다. 곰팡이에 의해 방출되는 VOCs의 변화는 과일의 냄새 품질에 부정적인 영향을 미칠 수 있고, 사람의 건강에도 나쁜 영향을 미칠 수 있다.

[0003] 사과는 저장 기간 동안의 질병에 매우 취약하며, 90종 이상의 곰팡이가 저장된 사과의 부패에 관여한다고 밝혀졌다. 몇몇 연구에서는 곰팡이-감염된 사과에서의 휘발성 화합물 변화에 대해 보고하였다. 하지만, 상기 연구들에서는 곰팡이-접종 및 곰팡이-미접종 사과의 VOCs를 비교하였을 뿐, 사과의 각 부패 단계 및 특정 감염 균주에 따라 변화하는 VOCs 검출에 대한 연구는 미흡한 실정이다.

## 선행기술문헌

### 특허문헌

[0004] (특허문헌 0001) 중국공개특허 CN105241821A (2016.01.13 공개)

## 발명의 내용

### 해결하려는 과제

[0005] 본 발명의 목적은 사과 부패 곰팡이 유래 휘발성 화합물을 포함하는 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물 및 이를 이용한 사과 부패 감지 방법을 제공하는 데에 있다.

### 과제의 해결 수단

[0006] 상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은 (E)-헥스-3-에닐 아세테이트((E)-hex-3-enyl acetate), 1-메틸-4-프로판-2-일벤젠(1-Methyl-4-propan-2-ylbenzene), 2-(2-에톡시에톡시)에탄올(2-(2-Ethoxyethoxy)ethanol), 메틸 벤조에이트(Methyl benzoate), 1-메틸-4-프로프-1-엔-2-일벤젠(1-Methyl-4-prop-1-en-2-ylbenzene), 아세트알데하이드(Acetaldehyde), 2-메틸프로판-1-올(2-Methylpropan-1-ol), 프로판-1-올(Propan-1-ol), 3-헥센-1-올(3-Hexen-1-ol), 2-메틸프로프-2-에날(2-Methylprop-2-enal), 펜탄-3-원(Pentan-3-one), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,3-디엔(1-Methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,3-diene), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,4-디엔(1-methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,4-diene), 2-펜틸퓨란(2-Pentylfuran), (E)-헥스-2-에날((E)-Hex-2-enal), 메틸 헵타노에이트(Methyl heptanoate), 1-메톡시-3-메틸벤젠(1-Methoxy-3-methylbenzene), 에틸 데카노에이트(Ethyl decanoate), 에틸 2-페닐아세테이트(Ethyl 2-phenylacetate), 디에틸 카보네이트(Diethyl carbonate), 프로필 옥타노에이트(Propyl octanoate), 1-옥텐-3-올(1-Octen-3-ol), 3-옥타논(3-Octanone), 페닐메탄올(Phenylmethanol), 2-에틸헥산-1-올(2-Ethylhexan-1-ol), 아세토펜론(Acetophenone), 에틸 (E)-2-메틸부트-2-에노에이트(Ethyl (E)-2-methylbut-2-enoate) 및 3-메틸부탈날(3-Methylbutanal)로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물을 유효성분으로 포함하는 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물을 제공한다.

[0007] 또한, 본 발명은 사과 샘플로부터 (E)-헥스-3-에닐 아세테이트((E)-hex-3-enyl acetate), 1-메틸-4-프로판-2-일벤젠(1-Methyl-4-propan-2-ylbenzene), 2-(2-에톡시에톡시)에탄올(2-(2-Ethoxyethoxy)ethanol), 메틸 벤조에이트(Methyl benzoate), 1-메틸-4-프로프-1-엔-2-일벤젠(1-Methyl-4-prop-1-en-2-ylbenzene), 아세트알데하이드(Acetaldehyde), 2-메틸프로판-1-올(2-Methylpropan-1-ol), 프로판-1-올(Propan-1-ol), 3-헥센-1-올(3-

Hexen-1-ol), 2-메틸프로프-2-에날(2-Methylprop-2-enal), 펜탄-3-원(Pentan-3-one), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,3-디엔(1-Methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,3-diene), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,4-디엔(1-methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,4-diene), 2-펜틸퓨란(2-Pentylfuran), (E)-헥스-2-에날((E)-Hex-2-enal), 메틸 헵타노에이트(Methyl heptanoate), 1-메톡시-3-메틸벤젠(1-Methoxy-3-methylbenzene), 에틸 데카노에이트(Ethyl decanoate), 에틸 2-페닐아세테이트(Ethyl 2-phenylacetate), 디에틸 카보네이트(Diethyl carbonate), 프로필 옥타노에이트(Propyl octanoate), 1-옥텐-3-올(1-Octen-3-ol), 3-옥타논(3-Octanone), 페닐메탄올(Phenylmethanol), 2-에틸헥산-1-올(2-Ethylhexan-1-ol), 아세토펜(Acetophenone), 에틸 (E)-2-메틸부트-2-에노에이트(Ethyl (E)-2-methylbut-2-enoate) 및 3-메틸부타날(3-Methylbutanal)로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물을 검출하는 단계를 포함하는 사과 부패 감지 방법을 제공한다.

### 발명의 효과

[0008] 본 발명은 사과 부패 곰팡이 유래 휘발성 화합물을 포함하는 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물에 관한 것으로서, 부패한 부사로부터 분리한 3가지의 부패균 보트리오스페리아 도치데아(*Botryosphaeria dothidea*), 페니실리움 익스판섬(*Penicillium expansum*), 알테르나리아 알테르나타(*Alternaria alternata*)를 사과에 인공 접종하여 온도  $25\pm1^{\circ}\text{C}$ , 상대 습도  $90\pm2\%$ 에서 보관하면서 접종하기 전과 접종 후 10% 미만으로 부패한 상태, 10~35% 부패한 상태, 35% 이상 부패한 상태의 단계에 맞춰 휘발성 성분을 분석하였다. 또한, 주요 부패 균주들 각각의 부패되면서 차별적으로 증가, 생성되는 휘발성 성분들을 분석하였다. 부패한 부사로부터 분리한 부패 원인균에 따른 사과 부패지수별 냄새 마커를 발굴하고, 냄새 DB를 구축하여 각 정보의 상관성 분석을 통하여 농산물 수확 후 관리시 부패에 의한 경제적 손실 및 다양한 농수축산식품의 부패 방지로 경제적 손실 저감에 기여할 것으로 예상된다.

### 도면의 간단한 설명

[0009] 도 1은 병원균 접종 사과에서 휘발성 성분에 대한 주성분 분석(principal-components analysis; PCA) 점수 플롯을 나타낸다.

도 2는 부패 지수에 따른 병원균 접종된 '부사' 사과에서의 부패 부위 패턴을 나타낸다. DI 0: 부패 지수 0; DI 1: 부패 지수 1; DI 2: 부패 지수 2; DI 3: 부패 지수 3; PE: 페니실리움 익스판섬(*Penicillium expansum*; PE) 접종; BD: 보트리오스페리아 도치데아(*Botryosphaeria dothidea*; BD) 접종; AA: 알테르나리아 알테르나타(*Alternaria alternata*; AA) 접종.

도 3은 본 발명의 실험 과정 모식도이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0010] 본 발명은 (E)-헥스-3-에닐 아세테이트((E)-hex-3-enyl acetate), 1-메틸-4-프로판-2-일벤젠(1-Methyl-4-propan-2-ylbenzene), 2-(2-에톡시에톡시)에탄올(2-(2-Ethoxyethoxy)ethanol), 메틸 벤조에이트(Methyl benzoate), 1-메틸-4-프로프-1-엔-2-일벤젠(1-Methyl-4-prop-1-en-2-ylbenzene), 아세트알데하이드(Acetaldehyde), 2-메틸프로판-1-올(2-Methylpropan-1-ol), 프로판-1-올(Propan-1-ol), 3-헥센-1-올(3-Hexen-1-ol), 2-메틸프로프-2-에날(2-Methylprop-2-enal), 펜탄-3-원(Pentan-3-one), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,3-디엔(1-Methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,3-diene), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,4-디엔(1-methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,4-diene), 2-펜틸퓨란(2-Pentylfuran), (E)-헥스-2-에날((E)-Hex-2-enal), 메틸 헵타노에이트(Methyl heptanoate), 1-메톡시-3-메틸벤젠(1-Methoxy-3-methylbenzene), 에틸 데카노에이트(Ethyl decanoate), 에틸 2-페닐아세테이트(Ethyl 2-phenylacetate), 디에틸 카보네이트(Diethyl carbonate), 프로필 옥타노에이트(Propyl octanoate), 1-옥텐-3-올(1-Octen-3-ol), 3-옥타논(3-Octanone), 페닐메탄올(Phenylmethanol), 2-에틸헥산-1-올(2-Ethylhexan-1-ol), 아세토펜(Acetophenone), 에틸 (E)-2-메틸부트-2-에노에이트(Ethyl (E)-2-methylbut-2-enoate) 및 3-메틸부타날(3-Methylbutanal)로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물을 유효성분으로 포함하는 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물을 제공한다.

[0011] 바람직하게는, 상기 사과 부패는 보트리오스페리아 도치데아(*Botryosphaeria dothidea*), 페니실리움 익스판섬(*Penicillium expansum*) 및 알테르나리아 알테르나타(*Alternaria alternata*)로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 균주에 의해 부패될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0012] 바람직하게는, (E)-헥스-3-에닐 아세테이트((E)-hex-3-enyl acetate), 1-메틸-4-프로판-2-일벤젠(1-Methyl-4-propan-2-ylbenzene), 1-메틸-4-프로프-1-엔-2-일벤젠(1-Methyl-4-prop-1-en-2-ylbenzene), 2-메틸프로판-1-올

(2-Methylpropan-1-ol), 프로판-1-올(Propan-1-ol), 3-헥센-1-올(3-Hexen-1-ol), 2-메틸프로프-2-에날(2-Methylprop-2-enal), 펜탄-3-원(Pentan-3-one), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,3-디엔(1-Methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,3-diene) 및 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,4-디엔(1-methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,4-diene)으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물을 유효성분으로 포함하는 보트리오포리아 도치데아(*Botryosphaeria dothidea*)에 의한 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물을 제공한다.

[0013] 바람직하게는, (E)-헥스-2-에날((E)-Hex-2-enal), 메틸 헵타노에이트(Methyl heptanoate), 1-메톡시-3-메틸벤젠(1-Methoxy-3-methylbenzene), 에틸 데카노에이트(Ethyl decanoate), 에틸 2-페닐아세테이트(Ethyl 2-phenylacetate), 디에틸 카보네이트(Diethyl carbonate), 프로필 옥타노에이트(Propyl octanoate), 1-옥텐-3-올(1-Octen-3-ol) 및 3-옥타논(3-Octanone)으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물을 유효성분으로 포함하는 페니실리움 익스판섬(*Penicillium expansum*)에 의한 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물을 제공한다.

[0014] 바람직하게는, 페닐메탄올(Phenylmethanol), 2-에틸헥산-1-올(2-Ethylhexan-1-ol) 및 아세토페논(Acetophenone)으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물을 유효성분으로 포함하는 알테르나리아 알테르나타(*Alternaria alternata*)에 의한 사과 부패 감지용 냄새 마커 조성물을 제공한다.

[0015] 바람직하게는, 상기 사과는 부사(Fuji)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0016] 또한, 본 발명은 사과 샘플로부터 (E)-헥스-3-에닐 아세테이트((E)-hex-3-enyl acetate), 1-메틸-4-프로판-2-일벤젠(1-Methyl-4-propan-2-ylbenzene), 2-(2-에톡시에톡시)에탄올(2-(2-Ethoxyethoxy)ethanol), 메틸 벤조에이트(Methyl benzoate), 1-메틸-4-프로프-1-엔-2-일벤젠(1-Methyl-4-prop-1-en-2-ylbenzene), 아세트알데하이드(Acetaldehyde), 2-메틸프로판-1-올(2-Methylpropan-1-ol), 프로판-1-올(Propan-1-ol), 3-헥센-1-올(3-Hexen-1-ol), 2-메틸프로프-2-에날(2-Methylprop-2-enal), 펜탄-3-원(Pentan-3-one), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,3-디엔(1-Methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,3-diene), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,4-디엔(1-methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,4-diene), 2-펜틸퓨란(2-Pentylfuran), (E)-헥스-2-에날((E)-Hex-2-enal), 메틸 헵타노에이트(Methyl heptanoate), 1-메톡시-3-메틸벤젠(1-Methoxy-3-methylbenzene), 에틸 데카노에이트(Ethyl decanoate), 에틸 2-페닐아세테이트(Ethyl 2-phenylacetate), 디에틸 카보네이트(Diethyl carbonate), 프로필 옥타노에이트(Propyl octanoate), 1-옥텐-3-올(1-Octen-3-ol), 3-옥타논(3-Octanone), 페닐메탄올(Phenylmethanol), 2-에틸헥산-1-올(2-Ethylhexan-1-ol), 아세토페논(Acetophenone), 에틸 (E)-2-메틸부트-2-에노에이트(Ethyl (E)-2-methylbut-2-enoate) 및 3-메틸부탈알(3-Methylbutanal)로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물을 검출하는 단계를 포함하는 사과 부패 감지 방법을 제공한다.

[0017] 바람직하게는, 사과 샘플로부터 (E)-헥스-3-에닐 아세테이트((E)-hex-3-enyl acetate), 1-메틸-4-프로판-2-일벤젠(1-Methyl-4-propan-2-ylbenzene), 1-메틸-4-프로프-1-엔-2-일벤젠(1-Methyl-4-prop-1-en-2-ylbenzene), 2-메틸프로판-1-올(2-Methylpropan-1-ol), 프로판-1-올(Propan-1-ol), 3-헥센-1-올(3-Hexen-1-ol), 2-메틸프로프-2-에날(2-Methylprop-2-enal), 펜탄-3-원(Pentan-3-one), 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,3-디엔(1-Methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,3-diene) 및 1-메틸-4-프로판-2-일사이클로헥사-1,4-디엔(1-methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,4-diene)으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물 검출시, 보트리오포리아 도치데아(*Botryosphaeria dothidea*)에 의한 사과 부패라고 판단할 수 있다.

[0018] 바람직하게는, 사과 샘플로부터 (E)-헥스-2-에날((E)-Hex-2-enal), 메틸 헵타노에이트(Methyl heptanoate), 1-메톡시-3-메틸벤젠(1-Methoxy-3-methylbenzene), 에틸 데카노에이트(Ethyl decanoate), 에틸 2-페닐아세테이트(Ethyl 2-phenylacetate), 디에틸 카보네이트(Diethyl carbonate), 프로필 옥타노에이트(Propyl octanoate), 1-옥텐-3-올(1-Octen-3-ol) 및 3-옥타논(3-Octanone)으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물 검출시, 페니실리움 익스판섬(*Penicillium expansum*)에 의한 사과 부패라고 판단할 수 있다.

[0019] 바람직하게는 사과 샘플로부터 페닐메탄올(Phenylmethanol), 2-에틸헥산-1-올(2-Ethylhexan-1-ol) 및 아세토페논(Acetophenone)으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나 이상의 휘발성 유기화합물 검출시, 알테르나리아 알테르나타(*Alternaria alternata*)에 의한 사과 부패라고 판단할 수 있다.

[0020] 바람직하게는, 상기 사과는 부사(Fuji)일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0021] 사과, 특히 부사(Fuji)는 특정 미생물에 의한 부패 증상을 나타내기도 하는데, 1) 물풍선처럼 물러지는 증상은 Bot rot(=white rot)이라 하며 보트리오포리아 도치데아(*Botryosphaeria dothidea*)에 의해 잘 발생하는 것은

로 알려져 있다. 2) 풍선의 바람이 빠지듯 물러지는 증상은 알테르나리아(*Alternaria*)에 의해 일어나는 증상으로 *Alternaria rot* 이라고 한다. 3) 나이트 모양을 나타낸다고 하여 *Ring rot*이라고 하며, 4) 탄저병이라고 부르는 증상은 *bitter rot*이라고 한다.

[0022] 이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 실시예를 들어 상세하게 설명하기로 한다. 다만 하기의 실시예는 본 발명의 내용을 예시하는 것일 뿐 본 발명의 범위가 하기 실시예에 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 실시예는 당업계에서 평균적인 지식을 가진 자에게 본 발명을 보다 완전하게 설명하기 위해 제공되는 것이다.

[0023] <실험예>

[0024] 하기의 실험예들은 본 발명에 따른 각각의 실시예에 공통적으로 적용되는 실험예를 제공하기 위한 것이다.

[0025] 1. 샘플의 준비

[0026] 사과(부사; Fuji)는 2016년 대한민국 충청도 충주에서 재배되었고, 일정한 모양, 크기 및 성숙 정도에 기초하여 질병이 없는 사과를 선별하였다. 표면 살균을 위하여, 각각의 사과 표면을 증류수로 씻어냈고, 70% 에탄올로 헹구었다.

[0027] 2. 병원균

[0028] 3가지 곰팡이 병원균, 보트리오프리아 도치데아(*Botryosphaeria dothidea*; BD), 페니실리움 엑스판섬(*Penicillium expansum*; PE), 알테르나리아 알테르나타(*Alternaria alternata*; AA)를 부패된 부사로부터 분리하였다. 상기 병원균은 단일 포자로 분리되었고, 감자 텍스트로스 아가(potato dextrose agar; PDA) 배지에 배양하였다.

[0029] 3. 화합물

[0030] 본 발명에 사용된 대부분의 휘발성 화합물은 Sigma-Aldrich (St. Louis, MO, USA)로부터 구입하였는데, 아세트알데히드(acetaldehyde) 및 헥실 아세테이트(hexyl acetate)는 Fluka (Milwaukee, WI, USA)로부터 구입하였다. 에탄올은 JT Baker (Philipsburg, NJ, USA)로부터 공급받았고, 아세트산, 클로로포름 및 벤젠은 Junsei (Chuo-ku, Tokyo, Japan)로부터 구입하였다.

[0031] 4. 단일 균주 접종 및 배양

[0032] 질병이 없는 각 사과 표면상 동일한 위치에 6.0 mm 지름의 구멍을 뚫었다. 단일 곰팡이 병원균을 포함하는 각각의 6.0 mm-감자 텍스트로스 아가 블럭 조각을 질병이 없는 부사에 접종하였다. 이후, 사과들은 대조군 사과(CF), 페니실리움 엑스판섬 접종 사과(PE), 보트리오프리아 도치데아 접종 사과(BD) 및 알테르나리아 알테르나타 접종 사과(AA)의 4개 그룹으로 나누었다. 모든 그룹은 3개의 사과 샘플로 이루어졌다. 접종된 사과는 온도 24 °C 및 상대 습도 90% 조건으로 항온항습배양기에서 배양하였다.

[0033] 5. 부패 지수(Decay index)

[0034] 사과의 부패 정도에 따라 총 4단계의 부패 지수(decay index; DI 0-3)를 사용하였다. DI 0 = 균 접종 전 부패 없는 정상 상태의 사과, DI 1 = 사과 표면 10% 미만 부패(약간 부패), DI 2 = 사과 표면 10~35% 부패(중간 부패), DI 3 = 사과 표면 35% 이상 부패(심각한 부패).

[0035] 6. 휘발성 화합물 분석

[0036] SPME 법을 이용하여 추출한 시료의 휘발성 향기성분은 6890N GC system과 5975 MSD(agilent technologies, Santa Clara, CA, USA)를 이용하여 분석하였다.

[0037] 사과의 휘발성 유기화합물을 분석하기 위하여 흡착시킨 SPME fiber를 250°C에서 5분간 유지하며 GC/MS에 휘발성 향기성분을 탈착시켰다. 탈착하는 5분 동안 액체질소를 이용하여 -80°C를 유지하는 cryo-focus system을 도입하였다. 컬럼은 HP-5MS UI capillary column(30m length × 0.25mm I.D., 0.15μm film thickness, J&W Scientific, Folsom, CA, USA)을 이용하였고, GC 오븐은 40°C에서 6분간 유지한 후 4°C/min의 속도로 220°C까지 올린 후 10°C/min의 속도로 250°C까지 올려 2분간 유지하였다. 이동상 기체로 helium을 0.8mL/min의 속도로 흘려주었으며, 주입기는 splitless 모드로 설정하였다. Mass scan range는 35-350 a.m.u.였으며 Scan rate는 4.45 scans/sec, Transfer line 온도는 280°C이고 Mass spectra ionization energy는 70eV였다.

[0038] 정확한 정량을 위하여 내부표준물질 2,3-dimethyl pyrazine (100 mg/L in methanol) 을 3μL 사용하여 peak area % 값을 (peak area/total peak area×100) 얻었다. 시료 간의 정량적인 차이를 줄이고 증가한 양을 배수

로 표현하기 위하여 fold change (relative peak area/해당 compound가 처음 동정된 시료의 relative peak area)를 도입하여 결과를 도출하였다. 각각의 VOC가 처음 동정되었을 때의 relative peak area 값을 1로 지정하고 그 다음 단계의 relative peak area 값을 배수로 표현하였다.

[0039] <실시예 1> 부패 지수에 따른 병원균 집중 사과에서의 휘발성 화합물 변화

[0040] 자연적으로 부패된 사과를 이용하여 메타 계층 분석을 수행한 예비실험 결과, 사과의 성장 및 저장 과정에서 주로 발생하는 곰팡이 병원균인 페니실리움 익스판섬, 보트리오프리아 도치테아 및 알테르나리아 알테르나를 확인하였고, 이에 본 발명에서는 상기 3종의 균주를 사과에 접종하여 부패되는 동안의 VOCs를 분석하였다.

[0041] 휘발성 성분의 GC-MS 데이터 세트에 대한 주성분 분석(principal-components analysis; PCA)을 적용하여, 각각의 병원균으로 접종된 사과 샘플을 부패 지수에 따라 구별할 수 있었다. 도 1은 2개의 주성분, PC1 및 PC2를 나타내는데, 전체 분산도는 50.08%를 나타낸다(각각 28.59% 및 21.49%). DI 0 샘플(병원균 접종 전)은 모두 PC1의 음성 차원에 위치하는데 비해, 알테르나리아 알테르나(AA)는 부패 지수가 증가할수록 PC2의 변화 없이 PC1의 양성 차원으로 이동하였다. 페니실리움 익스판섬(PE) 샘플은 PC1의 양성 차원 및 PC2의 음성 차원으로 점차적으로 이동하는데 비해, 보트리오프리아 도치테아(BD) 샘플은 부패지수가 증가할수록 PC1 및 PC2 모두 양성 차원으로 이동하였다. 일반적으로 사과 샘플은 부패 지수가 증가할수록 PC1의 양성 방향으로 이동하였으나, PC2는 접종 병원균에 따라 샘플이 분리되었다.

[0042] 표 1 및 표 2는 중요 변수 플롯(variables importance plot; VIP)(VIP > 0.60)의 수치에 의해 확인된 주요 휘발성 성분을 나타낸다. 이들 중, 42개의 휘발성 화합물이 DI 0이 위치한, PC1의 음성 차원 상에서 확인되는데 비해, 18개의 휘발성 화합물이 DI 3이 위치한, PC1의 양성 차원 상에서 확인되었다. PC1의 음성 차원과 관련된 유의성 있는 VOCs 중에서, 에스테르는 주요 화합물 그룹으로써 집중하지 않은 사과와 관련되어 있다. 2-메틸부틸 부타노에이트(2-Methylbutyl butanoate) 및 2-메틸부틸 2-메틸부타노에이트(2-methylbutyl 2-methylbutanoate)는 가장 높은 VIP 수치를 나타내고, 펜틸 2-메틸부타노에이트(pentyl 2-methylbutanoate), 펜틸 헥사노에이트(pentyl hexanoate) 및 다른 27개의 에스테르가 뒤를 이었다. 다른 그룹에서는 헥사날(hexanal)이 가장 높은 VIP 수치를 나타냈고, 톨루엔(toluene), 1,3-자일렌(1,3-xylene), 3,3-디메틸운데칸(3,3-dimethylundecane), 부탄-1-올(butan-1-ol), 2-메틸리덴부타날(2-methylidenebutanal), 6-메틸헵트-5-엔-2-온(6-methylhept-5-en-2-one), 1,2-자일렌(1,2-xylene), α-파네센(α-farnesene) 및 2-메틸부탄-2-올(2-methylbutan-2-ol)이 뒤를 이었다(표 1). 반면, VIP 수치에서 에스테르의 중요성은 PC1의 음성 차원보다 양성 차원에서 낮게 나타났는데, VIP 수치는 벤젠(benzene)이 가장 높았고, 벤즈알데히드(benzaldehyde)가 뒤를 이었다. 또한, PC1의 양성 차원에서 확인된 특정 화합물은 다음과 같다. 에틸 2-부테노에이트(ethyl 2-butenate) 및 에틸 프로파노에이트(ethyl propanoate)를 포함하는 몇몇 에스테르; 스티렌(styrene); 아세트알데하이드(acetaldehyde) 및 데카날(decanal)을 포함하는 몇몇 알데히드; 에탄올(ethanol), 페닐메탄올(phenylmethanol), 3-메틸부탄-1-올(3-methylbutan-1-ol) 및 1-옥텐-3-올(1-octen-3-ol)을 포함하는 몇몇 알코올; 헥산(hexane); 및 3-옥타논(3-octanone)(표 2).

표 1

| No.                 | Volatile compounds               | VIP  |
|---------------------|----------------------------------|------|
| <b>Esters</b>       |                                  |      |
| e37                 | 2-Methylbutyl butanoate          | 1.60 |
| e41                 | 2-Methylbutyl 2-methylbutanoate  | 1.60 |
| e44                 | Pentyl 2-methylbutanoate         | 1.59 |
| e54                 | Pentyl hexanoate                 | 1.59 |
| e48                 | Butyl hexanoate                  | 1.58 |
| e53                 | 3-Methylbutyl hexanoate          | 1.57 |
| e17                 | 2-Methylbutyl acetate            | 1.56 |
| e21                 | Pentyl acetate                   | 1.55 |
| e33                 | Hexyl acetate                    | 1.55 |
| e35                 | Butyl 2-methylbutanoate          | 1.55 |
| e59                 | Hexyl hexanoate                  | 1.55 |
| e18                 | Propyl butanoate                 | 1.53 |
| e28                 | Butyl butanoate                  | 1.53 |
| e20                 | Butyl propanoate                 | 1.52 |
| e12                 | Butyl acetate                    | 1.51 |
| e32                 | Pentyl propanoate                | 1.51 |
| e62                 | 3-Methylbutyl octanoate          | 1.51 |
| e57                 | 2-Methylbutyl heptanoate         | 1.49 |
| e13                 | Propan-2-yl butanoate            | 1.47 |
| e45                 | Hexyl 2-methylpropanoate         | 1.47 |
| e51                 | Hexyl 2-methylbutanoate          | 1.47 |
| e26                 | 2-Methylpropyl butanoate         | 1.45 |
| e30                 | 2-Methylpropyl 2-methylbutanoate | 1.33 |
| e46                 | 2-Methylpropyl hexanoate         | 1.32 |
| e27                 | 3-Methylbutyl propanoate         | 1.18 |
| e38                 | Propyl hexanoate                 | 1.16 |
| e7                  | 2-Methylpropyl acetate           | 1.12 |
| e43                 | Methyl octanoate                 | 1.11 |
| e22                 | Methyl hexanoate                 | 1.06 |
| e56                 | Hexyl 2-methylbut-2-enoate       | 1.00 |
| e5                  | Methyl butanoate                 | 0.98 |
| <b>Alcohols</b>     |                                  |      |
| ac4                 | Butan-1-ol                       | 1.29 |
| ac6                 | 2-Methylbutan-1-ol               | 0.87 |
| <b>Aldehydes</b>    |                                  |      |
| ah5                 | Hexanal                          | 1.47 |
| ah4                 | 2-Methylidenebutanal             | 1.11 |
| <b>Ketones</b>      |                                  |      |
| k5                  | 6-Methylhept-5-en-2-one          | 1.08 |
| <b>Benzenes</b>     |                                  |      |
| b2                  | Toluene                          | 1.41 |
| b6                  | 1,3-Xylene                       | 1.39 |
| b4                  | 1,2-Xylene                       | 0.96 |
| <b>Hydrocarbons</b> |                                  |      |
| h7                  | 3,3-Dimethylundecane             | 1.37 |
| <b>Terpenes</b>     |                                  |      |
| t5                  | $\alpha$ -Farnesene              | 0.90 |

[0043]

표 2

| No.          | Volatile compounds       | VIP  |
|--------------|--------------------------|------|
| Esters       |                          |      |
| e14          | Ethyl 2-butenate         | 0.80 |
| e3           | Ethyl propanoate         | 0.75 |
| e2           | Ethyl Acetate            | 0.71 |
| e6           | Ethyl 2-methylpropanoate | 0.65 |
| e47          | Ethyl benzoate           | 0.62 |
| e16          | 3-Methylbutyl acetate    | 0.60 |
| e39          | Methyl benzoate          | 0.60 |
| Alcohols     |                          |      |
| ac1          | Ethanol                  | 0.69 |
| ac15         | Phenylmethanol           | 0.69 |
| ac5          | 3-Methylbutan-1-ol       | 0.65 |
| ac11         | 1-Octen-3-ol             | 0.60 |
| Aldehydes    |                          |      |
| ac7          | Benzaldehyde             | 0.87 |
| ac1          | Acetaldehyde             | 0.73 |
| ac10         | Decanal                  | 0.63 |
| Ketones      |                          |      |
| k4           | 3-Octanone               | 0.60 |
| Benzenes     |                          |      |
| b1           | Benzene                  | 1.18 |
| b5           | Styrene                  | 0.77 |
| Hydrocarbons |                          |      |
| h1           | Hexane                   | 0.62 |

[0044]

[0045] <실시예 2> 접종 병원균에 따른 부패된 사과에서의 휘발성 화합물 비교

[0046] 도 2는 3종의 병원균-접종된 사과 샘플의 부패 부위를 부패 지수에 따라 나타냈다. 보트리오프리아 도치테아로 인한 부패 부위는 수분이 많고 부푼 형태의 연한-갈색 스팟을 보이고, 페니실리움 엑스판섬으로 접종된 부패 부위는 갈색 스팟 및 푸른색 곰팡이를 형성하며, 알테르나리아 알테르나로 접종된 부패 부위 역시 갈색을 보였다.

[0047] 3종의 다른 병원균으로 접종된 사과는 휘발성 화합물 프로파일에 있어서 양적 및 질적으로 다른 경향을 나타냈다. 표 3 내지 표 6에서는 각각의 균주로 접종된 사과에서 새롭게 생성되는 휘발성 화합물을 정리하였다. 표 3은 보트리오프리아 도치테아의 결과이고, 표 4는 페니실리움 엑스판섬의 결과이며, 표 5는 알테르나리아 알테르나로의 결과이다. 한편, 붉은 색으로 표시된 화합물은 각각의 균주에서 단독으로 생성된 성분이다.

표 3

| 우선순위 | class    | Possible Compound                                                   | 군  | Decay index                    |      |      |      |
|------|----------|---------------------------------------------------------------------|----|--------------------------------|------|------|------|
|      |          |                                                                     |    | Area % = (성분 area/전체 area)*100 |      |      |      |
|      |          |                                                                     |    | DI0                            | DI1  | DI2  | DI3  |
| 1    | Ester    | (E)-hex-3-enyl acetate                                              | BD | -                              | 0.23 | 0.45 | -    |
|      | Benzene  | 1-Methyl-4-propan-2-ylbenzene                                       | BD | -                              | 0.35 | 0.74 | 0.37 |
|      | Alcohol  | 2-(2-Ethoxyethoxy)ethanol                                           | BD | -                              | 0.44 | 0.10 | -    |
|      | Ester    | Methyl benzoate                                                     | BD | -                              | 0.15 | -    | -    |
| 2    | Benzene  | 1-Methyl-4-prop-1-en-2-ylbenzene                                    | BD | -                              | -    | 0.36 | 0.10 |
|      | Aldehyde | Acetaldehyde                                                        | BD | -                              | -    | 0.01 | 0.18 |
| 3    | Alcohol  | 2-Methylpropan-1-ol                                                 | BD | -                              | -    | -    | 4.77 |
|      | Alcohol  | Propan-1-ol                                                         | BD | -                              | -    | -    | 0.23 |
|      | Alcohol  | 3-Hexen-1-ol                                                        | BD | -                              | -    | -    | 0.08 |
|      | Aldehyde | 2-Methylprop-2-enal                                                 | BD | -                              | -    | -    | 0.05 |
|      | Ketone   | Pentan-3-one                                                        | BD | -                              | -    | -    | 0.10 |
|      | Terpene  | 1-Methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,3-diene<br>( $\alpha$ -Terpinene) | BD | -                              | -    | -    | 0.08 |
|      | Terpene  | 1-methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,4-diene<br>( $\alpha$ -Terpinene) | BD | -                              | -    | -    | 0.01 |
|      | Furan    | 2-Pentylfuran                                                       | BD | -                              | -    | -    | 0.15 |

[0048]

표 4

| 우선순위 | class    | Possible Compound         | 군  | Decay index                    |      |      |      |
|------|----------|---------------------------|----|--------------------------------|------|------|------|
|      |          |                           |    | Area % = (성분 area/전체 area)*100 |      |      |      |
|      |          |                           |    | DI0                            | DI1  | DI2  | DI3  |
| 1    | Aldehyde | (E)-Hex-2-enal            | PE | -                              | 0.06 | 0.03 | -    |
|      | Ester    | Methyl heptanoate         | PE | -                              | 0.13 | 0.05 | -    |
|      | Benzene  | 1-Methoxy-3-methylbenzene | PE | -                              | 0.49 | 0.29 | 0.17 |
|      | Ester    | Methyl benzoate           | PE | -                              | 0.05 | 0.02 | 0.06 |
| 2    | Ester    | Ethyl decanoate           | PE | -                              | -    | 0.06 | -    |
|      | Ester    | Ethyl 2-phenylacetate     | PE | -                              | -    | 0.16 | 0.06 |
|      | Ester    | Diethyl carbonate         | PE | -                              | -    | 0.04 | 0.13 |
|      | Ester    | Propyl octanoate          | PE | -                              | -    | 0.01 | -    |
|      | Aldehyde | Acetaldehyde              | PE | -                              | -    | 0.01 | 0.10 |
|      | Furan    | 2-Pentylfuran             | PE | -                              | -    | 0.05 | -    |
|      | Alcohol  | 1-Octen-3-ol              | PE | -                              | -    | -    | 2.41 |
| 3    | Ketone   | 3-Octanone                | PE | -                              | -    | -    | 0.59 |

[0049]

표 5

| 우선순위 | class   | Possible Compound         | 군  | Decay index                    |      |      |      |
|------|---------|---------------------------|----|--------------------------------|------|------|------|
|      |         |                           |    | Area % = (성분 area/전체 area)*100 |      |      |      |
|      |         |                           |    | DI0                            | DI1  | DI2  | DI3  |
| 1    | Alcohol | Phenylmethanol            | AA | -                              | 0.10 | 0.21 | 0.45 |
|      | Alcohol | 2-(2-Ethoxyethoxy)ethanol | AA | -                              | 0.40 | -    | -    |
| 2    | Alcohol | 2-Ethylhexan-1-ol         | AA | -                              | -    | 0.08 | 0.83 |
|      | Ketone  | Acetophenone              | AA | -                              | -    | -    | 0.06 |

[0050]

[0051]

한편, 상기 3종의 군주에서 공통으로 생성된 화합물은 표 6과 같다.

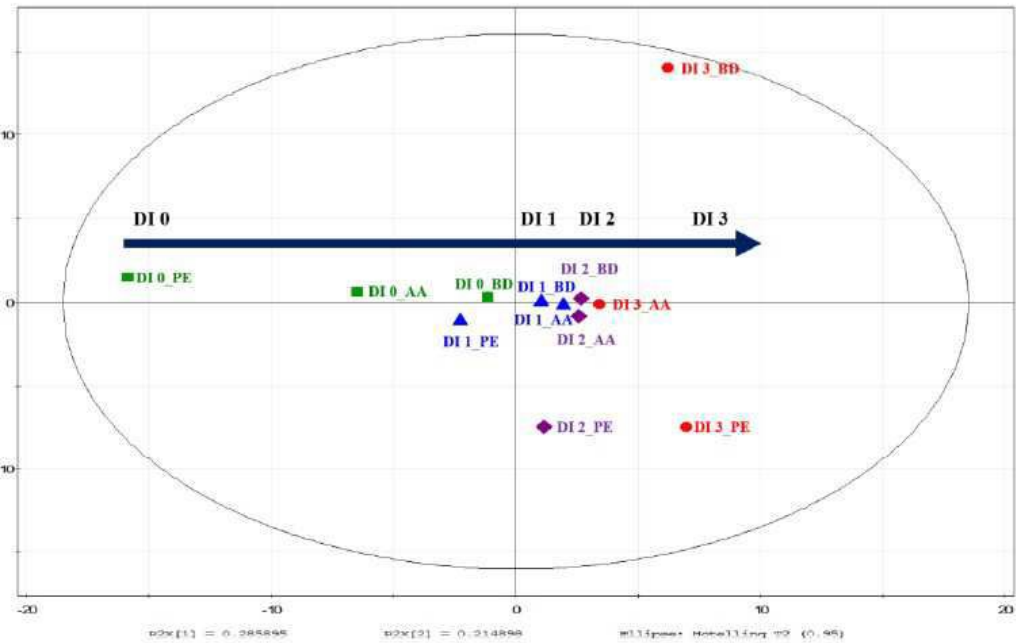
표 6

| 우선순위 | class    | Possible Compound              | 군  | Decay index                    |      |      |      |
|------|----------|--------------------------------|----|--------------------------------|------|------|------|
|      |          |                                |    | Area % = (성분 area/전체 area)*100 |      |      |      |
|      |          |                                |    | DI0                            | DI1  | DI2  | DI3  |
| 1    | Ester    | Ethyl (E)-2-methylbut-2-enoate | BD | -                              | 0.06 | 0.23 | 0.09 |
|      |          |                                | PE | -                              | 0.18 | 0.83 | 0.18 |
|      |          |                                | AA | -                              | -    | 0.23 | 0.03 |
| 2    | Aldehyde | 3-Methylbutanal                | BD | -                              | -    | -    | 0.06 |
|      |          |                                | PE | -                              | -    | -    | 0.04 |
|      |          |                                | AA | -                              | -    | -    | 0.02 |

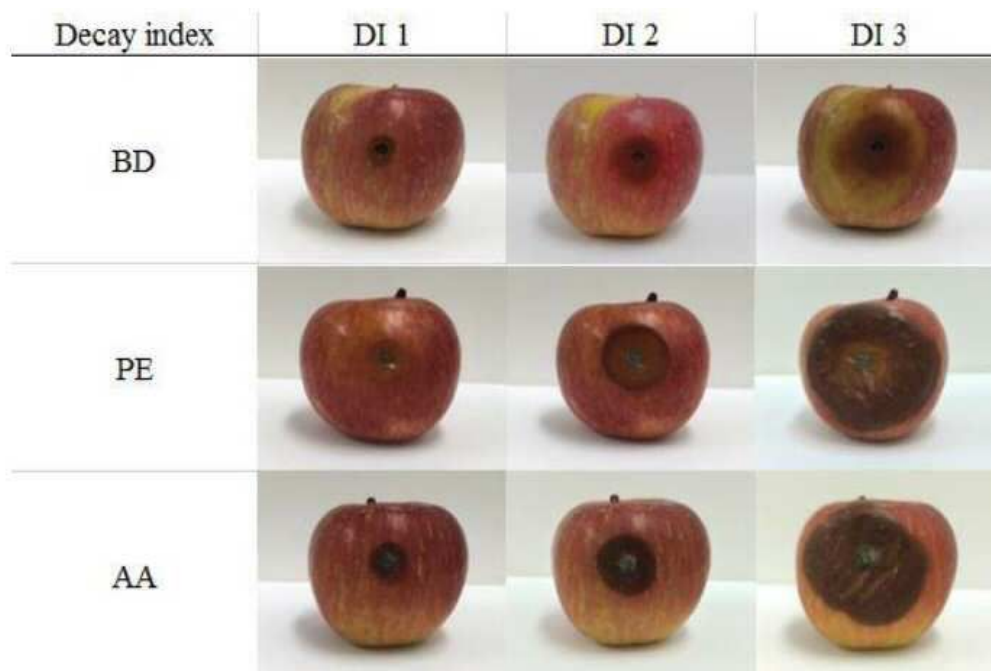
[0052]

도면

도면1



도면2



도면3

