



## Research Article

# Comparative analysis of volatile sulfur compound composition in different types of *kimchi*

## 김치류의 휘발성 황화합물 조성 비교

Keono Kim<sup>1</sup>, Hyeongyu Lee<sup>1</sup>, Samuel Park<sup>1</sup>, Heon-Woong Kim<sup>2</sup>, Jeehye Sung<sup>1\*</sup>

김건오<sup>1</sup> · 이현규<sup>1</sup> · 박사무엘<sup>1</sup> · 김현웅<sup>2</sup> · 성지혜<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Food Science and Biotechnology, Gyeongbuk National University, Andong 36729, Korea

<sup>2</sup>Department of Agrofood Resources, Food and Nutrition Division, National Institute of Agricultural Sciences, Rural Development Administration, Wanju 55365, Korea

<sup>1</sup>국립경북대학교 식품생명공학과, <sup>2</sup>국립농업과학원 농식품자원부

**Abstract** *Kimchi* is a traditional Korean fermented food produced from various vegetables and is characterized by a wide range of sulfur-containing compounds generated during processing. In this study, volatile sulfur compounds (VSCs) in 11 types of *kimchi* were comprehensively analyzed using headspace solid-phase microextraction coupled with gas chromatography–mass spectrometry (HS-SPME/GC-MS). A total of 35 VSCs were identified and classified into mercaptans, mono-, di-, and trisulfides, isothiocyanates, sulfur-containing heterocycles, and other sulfur compounds. Disulfides were the predominant VSC class in most *kimchi* samples, whereas the relative contributions of trisulfides, isothiocyanates, and sulfur-containing heterocycles varied depending on *kimchi* type. Diallyl sulfide and allyl methyl disulfide were consistently detected across all *kimchi* samples, suggesting their potential as representative sulfur markers in *kimchi*. Multivariate statistical analyses revealed clear differences in VSC profiles among *kimchi* types, likely reflecting variations in raw materials and sulfur-containing precursor compositions. Overall, this study provides a systematic overview of VSC distribution in diverse *kimchi* products and offers fundamental data for understanding the chemical characteristics underlying *kimchi* diversity.

**Keywords** *kimchi*, volatile sulfur compounds, HS-SPME, GC-MS



OPEN ACCESS

**Citation:** Kim K, Lee H, Park S, Kim HW, Sung J. Comparative analysis of volatile sulfur compound composition in different types of *kimchi*. Food Sci. Preserv., 33(4), 686-695 (2026)

**Received:** March 19, 2026

**Revised:** May 27, 2026

**Accepted:** June 07, 2026

### \*Corresponding author

Jeehye Sung  
Tel: +82-54-820-5752  
E-mail: jeehye@gknu.ac.kr

Copyright © 2026 The Korean Society of Food Preservation. This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

## 1. 서론

김치는 채소류를 주원료로 하여 젖산균 발효 과정을 거쳐 제조되는 한국의 대표적인 전통 발효식품으로, 비타민, 무기질 및 식이섬유 등 다양한 영양 성분을 함유하고 있다(Choi 등, 2022). 또한 김치는 다양한 채소 원료에서 유래한 클로로필, 플라보노이드, 카로티노이드 등 여러 파이토케미컬을 포함하고 있어, 항산화 및 항염증 활성을 포함한 다양한 생리활성과의 연관성이 보고되어 있다(Song 등, 2024). 김치는 제조 지역의 특성, 제조 방법, 사용 재료 등에 따라 다양한 종류로 구분되며, 국내에서 소비되는 김치의 유형 또한 매우 다양하다(Lee 등, 2023). 김치 제조에 주로 사용되는 배추, 마늘, 파, 갓 및 고들빼기 등의 채소류에는 황(S)을 포함하는 배당체 화합물이 존재하며, 가공 과정에서 물리적 조직 파괴와 효소 활성에 의해 휘발성 황화합물(volatile sulfur compounds, VSCs)로 전환된다(Sung 등, 2025).

VSCs는 황 원자를 포함하는 저분자 화합물로 높은 반응성을 지니며, 매우 낮은 농도에서도 강한

향기 활성을 나타낸다(Luo 등, 2024). 이러한 VSCs는 배추, 마늘 및 파와 같은 황 함유 채소에서 유래하여 특유의 알싸한 향을 부여할 뿐만 아니라(Hwang 등, 2023; Kim 등, 2005), 김치 특유의 향미 형성에도 중요한 역할을 하는 것으로 알려져 있다(Hong 등, 2016). 또한 일부 VSCs는 항산화, 항암, 항염증, 미생물 증식 억제, 콜레스테롤 저하 및 동맥경화 개선과 관련성이 알려져 있어(Petropoulos 등, 2017; Ross 등, 2001), 김치의 감각적 특성에 기여할 뿐만 아니라 기능적 측면에서도 중요한 역할을 하는 것으로 보고되고 있다.

현재까지 김치의 VSCs에 관한 연구는 주로 특정 김치 품목에 한정되어 있으며, 저장 또는 발효 기간에 따른 성분 변화를 규명하는 데 초점을 맞추어 수행되어왔다. Seo 등(2024)은 배추김치의 염장 및 발효 조건에 따른 VSCs 조성을 보고하였으며, Choi 등(2024)은 발효 기간에 따른 배추김치의 VSCs 변화를 분석하였다. Kim 등(2006)은 갓김치를 대상으로 저온 저장 중 VSCs 함량 변화를 조사한 바 있다. 그러나 다양한 김치 유형 간 VSCs 조성 차이를 동일한 분석 조건에서 체계적으로 비교·분석한 연구는 제한적인 실정이다. 김치는 사용되는 채소의 종류에 따라 황 함유 화합물의 조성 및 함량이 상이할 수 있으며, 이에 따라 최종적으로 형성되는 VSCs의 조성 및 분포 또한 김치 종류별로 차이를 보일 가능성이 있다. 따라서 이러한 조성 차이를 통합적으로 비교하는 접근은 김치 VSCs의 전반적인 분포 특성을 이해하는 데 중요한 의미를 가진다.

따라서 본 연구에서는 국내에서 주로 소비되는 김치류 11종(갓김치, 깍두기, 나박김치, 동치미, 백김치, 오이소박이, 총각김치, 고들빼기김치, 배추김치, 열무김치, 파김치)을 대상으로 HS-SPME/GC-MS 기반 VSCs 프로파일을 비교하고, 다변량 분석을 통해 김치 유형별 VSCs 특성의 차이를 체계적으로 분석하고자 하였다. 본 연구를 통해 다양한 김치 유형 간 VSCs 조성 차이를 제시하고, 김치의 화학적 특성 이해 및 품질 특성 평가를 위한 기초 자료를 제공하고자 한다.

## 2. 재료 및 방법

### 2.1. 실험재료 및 시약

본 연구에서 사용된 김치 시료는 총 11종(갓김치, 깍두기, 나박김치, 동치미, 백김치, 오이소박이, 총각김치, 고들빼기김치, 배추김치, 열무김치, 파김치)으로 국내에서 대중적으로 소비되는 주요 김치 품목들을 위주로 구성하여 2024년 농촌진흥청에서 제공받았으며, 분석 전까지 -80°C에서 보관하였다. 모든 시료는 실험에 사용되기 전에 액체질소를 이용하여 동결 분쇄한 후 균질화하여 김치 페이스트의 형태로 분석을 진행하였다. VSCs의 정량분석을 위해 내부표준물질로 사용된 ethyl methyl sulfide는 Sigma-Aldrich (St. Louis, MO, USA)에서 구입하였다. 표준물질로는 총 20종의 VSCs를 사용하였으며, dimethyl

disulfide, allyl mercaptan, dipropyl disulfide, allyl isothiocyanate, diallyl disulfide, phenethyl isothiocyanate, 3-methylthiopropyl isothiocyanate, erucin, diallyl sulfide, allyl methyl sulfide, methyl propyl trisulfide는 Sigma-Aldrich에서 구입하였고, dimethyl trisulfide, dipropyl trisulfide, allyl methyl disulfide, methyl propyl disulfide, allyl propyl disulfide, propylene sulfide, 3-butenyl isothiocyanate는 TCI (Tokyo, Japan)에서 구입하였으며, 2,4-dimethylthiophene, hexyl isothiocyanate는 RHAWN (Shanghai, China)에서 구입하였다. 분석에 사용된 methanol은 HPLC 등급의 Honeywell (Charlotte, NC, USA) 제품을 사용하였다. 머무름 지수(retention index, RI) 계산을 위해 사용된 n-alkane (C7-C30)은 Sigma-Aldrich에서 구입하였다.

### 2.2. VSCs 분석

김치 시료의 VSCs를 분석하기 위해 headspace solid-phase microextraction (HS-SPME)이 장착된 GERSTEL MPS 2XL autosampler (Mülheim an der Ruhr, Germany)를 이용하여 gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS; 8890A GC/5977B MSD, Agilent Technologies, Santa Clara, CA, USA)로 분석을 수행하였다. 본 연구에 사용된 11종의 김치는 종류에 따라 점도 및 유동성에 차이가 있어, SPME 포집 시 시료의 원활한 교반과 VSCs의 효과적인 방출이 가능하도록 시료량과 증류수의 첨가량을 조절하였다. 시료는 3-5 g 범위에서 취하였고, 증류수는 시료 혼합물의 최종 부피가 6 mL이 되도록 1-3 mL 범위에서 가감하였다. 이때 모든 시료는 교반 시 균질한 상태가 유지되도록 조정된 후 동일한 최종 부피 조건에서 분석하였다. 이후 내부표준물질로 ethyl methyl sulfide (2,500 µg/mL)를 10 µL 첨가하였다. 이후 시료를 45°C에서 10분간 교반하였으며, 50/30 µm, divinylbenzene/carboxen/polydimethylsiloxane (DVB/CAR/PDMS)이 코팅된 SPME fiber (Supelco, Bellefonte, PA, USA)를 사용하여 40분간 VSCs를 포집하였다. VSCs가 포집된 SPME fiber는 DB-WAX column (30 m × 0.25 mm i.d. 0.25 µm film thickness; Agilent Technologies)이 장착된 GC-MS 시스템의 주입구에 주입하여 10분간 탈착시켰다. 주입구 온도는 250°C로 설정하였으며, 오븐 온도는 35°C에서 2분간 유지한 후 2°C/min의 속도로 45°C까지 승온하였고, 이후 5°C/min의 속도로 130°C까지 상승시켰다. 이어서 10°C/min의 속도로 225°C까지 승온한 뒤 5분간 유지하였으며, 최종적으로 15°C/min의 속도로 250°C까지 상승시켰다. Carrier gas는 helium을 사용하였으며, 유속은 1.5 mL/min, split ratio는 1:10으로 설정하였다. 질량분석기는 electron ionization (EI) 방식으로 70 eV의 이온화 에너지를 사용하였고, m/z 35-550 범위에서 scan mode로 분석을 진행하였다.

### 2.3. VSCs의 정성 및 정량 분석 방법

분석된 VSCs는 질량 스펙트럼을 NIST 20 library (National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, USA)와 비교하여 동정하였다. 머무름 지수(retention index, RI)는 n-alkane (C7-C30)을 이용하여 다음 식에 따라 계산하였다(Wei 등, 2024).

$$RI = 100 \times [n + (tR(x) - tR(n)) / (tR(n+1) - tR(n))]$$

n은 분석 대상 화합물 x보다 먼저 검출되는 n-alkane의 탄소 수이며, tR(x)는 화합물 x의 머무름 시간, tR(n)과 tR(n+1)은 각각 탄소수 n 및 n+1인 n-alkane의 머무름 시간을 의미한다. 분리된 VSCs 중 표준품을 확보할 수 있는 경우 실제 표준품을 이용하여 검량선을 작성한 후 정량하였으며, 각 VSCs 표준물질의 검량선 식과 결정계수( $R^2$ )는 Table 1과 같다. 표준품이 없는 경우 내부표준물질 방법을 적용하여 정량하였다(Kim 등, 2025). 모든 시료는 분석의 재현성 확인을 위해 2회 반복하여 분석하였다.

### 2.4. 통계 분석

실험 결과는 평균  $\pm$  표준편차로 나타내었으며, GraphPad Prism 8 (GraphPad software, San Diego, CA, USA)를 이용하여 시각화하였다. 시료 간 유의성 검정을 위해 SAS 9.4 software (SAS Institute Inc. Cary, NC, USA)를 사용하여 일원분산분석(one-way analysis of variance, ANOVA)를 수행하였으며, 사후 검정은 Tukey's honestly significant difference (HSD) test를 적용하여  $p < 0.05$  수준에서 통계적 유의성을 판단하였다. 다변량 통계분석을 위해 주성분 분석(principal component analysis, PCA)과 계층적 군집분석(hierarchical clustering analysis, HCA)을 XLSTAT 2019 (Addinsoft, NY, USA)를 사용하여 수행하였으며, heatmap은 TBtools-II v2.376을 이용하여 작성하였다(Chen 등, 2023).

## 3. 결과 및 고찰

### 3.1. 김치의 VSCs 프로파일링

11종의 김치 시료를 대상으로 HS-SPME/GC-MS 분석을 수

**Table 1.** Standards and calibration data for the quantification of volatile sulfur compounds in 11 types of *kimchi*

| No. | Compound                          | Purity (%)  | Source        | Calibration equations   | Correlation coefficients ( $R^2$ ) |
|-----|-----------------------------------|-------------|---------------|-------------------------|------------------------------------|
| 1   | Dimethyl disulfide                | > 98.5      | Sigma-Aldrich | $y = 0.7933x - 0.1260$  | 0.9996                             |
| 2   | Dimethyl trisulfide               | > 98.0      | TCI           | $y = 0.3689x + 0.2827$  | 0.9712                             |
| 3   | Allyl mercaptan                   | > 60.0      | Sigma-Aldrich | $y = 0.1251x - 0.0935$  | 0.9527                             |
| 4   | Dipropyl disulfide                | 98.0        | Sigma-Aldrich | $y = 1.0014x - 0.3216$  | 0.9831                             |
| 5   | Dipropyl trisulfide               | > 98.0      | TCI           | $y = 0.6707x - 0.3302$  | 0.9792                             |
| 6   | Allyl methyl disulfide            | > 90.0      | TCI           | $y = 2.7356x - 0.4114$  | 0.9835                             |
| 7   | Allyl isothiocyanate              | 99.7        | Sigma-Aldrich | $y = 2.6769x + 0.4605$  | 0.9423                             |
| 8   | Diallyl disulfide                 | $\geq 98.0$ | Sigma-Aldrich | $y = 7.4197x - 1.1885$  | 0.9995                             |
| 9   | Phenethyl isothiocyanate          | 99.0        | Sigma-Aldrich | $y = 2.6900x - 2.2710$  | 0.9774                             |
| 10  | 3-Methylthiopropyl isothiocyanate | $\geq 98.0$ | Sigma-Aldrich | $y = 2.1561x - 2.0029$  | 0.9982                             |
| 11  | Erucin                            | $\geq 98.0$ | Sigma-Aldrich | $y = 7.5333x - 26.1420$ | 0.9523                             |
| 12  | Methyl propyl disulfide           | > 97.0      | TCI           | $y = 2.3954x - 0.5715$  | 0.9973                             |
| 13  | Diallyl sulfide                   | 97.0        | Sigma-Aldrich | $y = 1.7624x - 0.1304$  | 0.9798                             |
| 14  | Allyl propyl disulfide            | > 88.0      | TCI           | $y = 12.6470x - 4.2867$ | 0.9986                             |
| 15  | Allyl methyl sulfide              | 98.0        | Sigma-Aldrich | $y = 0.5560x + 0.0055$  | 0.9989                             |
| 16  | 2,4-Dimethylthiophene             | 98.0        | RHAWN         | $y = 3.6569x + 0.0195$  | 0.9990                             |
| 17  | Hexyl isothiocyanate              | 97.0        | RHAWN         | $y = 5.1734x - 2.5919$  | 0.9890                             |
| 18  | Methyl propyl trisulfide          | 50.0        | Sigma-Aldrich | $y = 5.2704x - 11.265$  | 0.9769                             |
| 19  | Propylene sulfide                 | > 98.0      | TCI           | $y = 0.1826x - 0.0506$  | 0.9985                             |
| 20  | 3-Butenyl isothiocyanate          | > 96.0      | TCI           | $y = 5.9308x - 0.6403$  | 0.9977                             |

행한 결과, 총 35종의 VSCs가 동정되었다(Table 2와 Fig. 1). 분석 결과, 동정된 모든 VSCs의 함량은 김치 시료 간에 통계적으로 유의미한 차이를 나타내었다( $p < 0.05$ ). 확인된 화합물은 mercaptan류 3종, monosulfide류 3종, disulfide류 14종, trisulfide류 3종, isothiocyanate류 7종, sulfur-containing heterocycle류 4종 및 기타 화합물 1종으로 분류되었다.

Mercaptan (thiol)은 매우 낮은 냄새 역치(odor threshold)를 가지며, 소량으로도 자극적이고 불쾌한 향을 유발하는 성분으로 알려져 있다(Chen 등, 2019). 본 연구에서 mercaptan류는 동치미, 백김치, 총각김치 및 파김치에서만 검출되었으며, 전반적으로 낮은 함량 수준을 보였다. Propyl mercaptan은 파김치에서  $7.30 \mu\text{g/g}$ 로 유일하게 검출되었다. Methanethiol은  $0.25\text{--}2.10 \mu\text{g/g}$  범위로 동치미, 백김치 및 총각김치에서 검출되었으며, allyl mercaptan은 동치미( $1.59 \mu\text{g/g}$ )와 백김치( $1.74 \mu\text{g/g}$ )에서만 확인되었다.

Sulfide류는 김치의 대표적인 VSCs로, 파와 마늘 등 *Allium* 속 채소에 함유된 황 함유 아미노산 전구체[S-alk(en)yl-L-cysteine sulfoxides]가 조직 손상 시 효소적 반응을 거쳐 형성되며, alliinase의 작용을 통해 allicin으로 전환되는 것으로 보고되어 있다(Kang 등, 2018). 이후 생성된 allicin은 화학적으로 불안정하여 비효소적 분해 및 재배열 반응을 거치면서 diallyl sulfide, diallyl disulfide 및 diallyl trisulfide와 같은 다양한 sulfide류로 전환되는 것으로 알려져 있다(Rose 등, 2019). 또한 일부 sulfide류는 마늘의 특징적인 향기성분을 구성할 뿐만 아니라, 약리효과와 관련된 연구도 보고된 바 있다(Song 등, 2009). 이러한 경로를 고려할 때, 본 연구에서 disulfide류가 대부분의 김치 시료에서 주요 VSCs군으로 확인된 결과는 김치 제조에 공통적으로 사용되는 마늘과 파 등 *Allium* 유래 부재료의 황 함유 아미노산 전구체가 sulfide류 형성에 기여했을 가능성을 시사한다. 특히 diallyl sulfide와 allyl methyl disulfide가 모든 김치 시료에서 공통적으로 검출된 점은 이러한 *Allium* 유래 sulfide 형성 경로가 다양한 김치류에서 공통적으로 관여할 수 있음을 보여준다. 본 연구에서 확인된 sulfide류는 monosulfide, disulfide 및 trisulfide로 구분되었다. Monosulfide류는 동치미, 백김치, 총각김치, 파김치에서만 검출되었다. Propylene sulfide는 고들빼기김치( $1.42 \mu\text{g/g}$ )와 파김치( $3.97 \mu\text{g/g}$ )에서만 확인되었으며, allyl methyl sulfide는  $0.39\text{--}4.70 \mu\text{g/g}$  범위로 고들빼기김치와 열무김치를 제외한 대부분의 김치류에서 확인되었다. Diallyl sulfide는  $0.19\text{--}2.67 \mu\text{g/g}$  범위로 모든 김치 시료에서 공통적으로 존재하였다. Disulfide류는 대부분의 김치에서 주요 VSCs로 확인되었으며, dimethyl disulfide, allyl methyl disulfide, diallyl disulfide 등 다양한 propenyl 및 propyl 치환 disulfide 화합물들이 검출되었다. (Z)-1-allyl-2-(prop-1-en-1-yl)disulfane은 disulfide류 중 가장 높은 함량을 나타내었으며, 특히 총각김치( $62.10 \mu\text{g/g}$ ), 배추김치( $25.70 \mu\text{g/g}$ ) 및 파김치

( $19.30 \mu\text{g/g}$ )에서 다량 검출되었다. 해당 성분은 마늘 유래 VSCs로 보고된 바 있다(Marcinkowska와 Jeleń, 2022; Mi 등, 2021). Trisulfide류 중 dimethyl trisulfide는  $1.81\text{--}75.26 \mu\text{g/g}$  범위로 확인되었으며, 갓김치( $75.26 \mu\text{g/g}$ )와 총각김치( $47.48 \mu\text{g/g}$ )에서 높은 함량을 나타내었다. Gao 등(2021)은 dipropyl trisulfide를 파김치의 주요 VSCs로 보고하였으며, 해당 성분은 본 연구의 파김치에서도  $1.57 \mu\text{g/g}$ 로 검출되었다.

Isothiocyanate류는 배추, 무, 갓 등 십자화과(*Brassicaceae*) 채소에 함유된 glucosinolate가 조직 손상 시 myrosinase에 의해 효소적으로 가수분해되면서 생성되는 화합물로 알려져 있다. 이러한 isothiocyanate류는 체내 해독효소(detoxifying enzyme)의 활성을 유도하여 항암 활성을 나타내는 것으로 보고된 바 있으며(Ko 등, 2015; Pyo 등, 2000), 세포막 손상 및 세포 내 산화 스트레스 유도과 같은 기전을 통해 항균 작용을 나타내는 것으로도 알려져 있다(Romeo 등, 2018). 갓김치에서 allyl isothiocyanate가  $35.09 \mu\text{g/g}$ 로 isothiocyanate류 중 가장 높은 함량을 나타낸 것은 갓에 존재하는 glucosinolate 전구체가 조직 파괴 및 제조 과정에서 myrosinase에 의해 가수분해되면서 해당 화합물의 형성에 기여했을 가능성을 보여준다. 또한 3-butenyl isothiocyanate와 phenethyl isothiocyanate는 각각  $0.19\text{--}0.67 \mu\text{g/g}$  및  $1.68\text{--}5.79 \mu\text{g/g}$  범위로 검출되었으며, 두 성분 모두 갓김치에서 상대적으로 높은 함량을 나타내었다. 이러한 결과는 갓의 원료 특성과 관련된 isothiocyanate 생성 특성을 반영하는 것으로 판단된다. Cho 등(1993)과 Kim 등(2006)은 갓의 주요 isothiocyanate로 allyl isothiocyanate, 3-butenyl isothiocyanate 및 phenethyl isothiocyanate를 보고한 바 있다. 본 연구에서도 갓김치에서 이들 화합물이 주요 isothiocyanate로 확인되어, 선행 연구 결과와 유사한 결과를 보였다. 한편, hexyl isothiocyanate ( $0.97 \mu\text{g/g}$ ), 3-methylthiopropyl isothiocyanate ( $1.86 \mu\text{g/g}$ ), erucin ( $6.81 \mu\text{g/g}$ ), trans-raphasatin ( $0.20 \mu\text{g/g}$ )은 동치미에서만 확인되었다.

Sulfur-containing heterocycle류는 식품의 발효 또는 가공 과정에서 아미노산, 당 및 황 함유 화합물 간의 반응을 통해 형성될 수 있는 성분으로, 독특한 향미 특성으로 인해 감칠맛(savory flavor)과 관련된 성분으로 보고되어 있다(Marcinkowska와 Jeleń, 2022; Yu 등, 2012). 파김치에서는 2,4-dimethylthiophene ( $0.29 \mu\text{g/g}$ )과 3-vinyl-1,2-dithiacyclohex-4-ene ( $1.50 \mu\text{g/g}$ )이 확인되었다. 나박김치에서는 1-cyano-4,5-epithiopentane ( $5.25 \mu\text{g/g}$ )이 검출되었으며, 백김치에서는 4-ethyl-5-methylthiazole ( $8.50 \mu\text{g/g}$ )이 비교적 높은 수준으로 확인되었다. 또한 고들빼기김치에서는 3-vinyl-1,2-dithiacyclohex-4-ene이  $0.80 \mu\text{g/g}$ 로 검출되었다. 기타 화합물로 분류된 carbon disulfide는 파김치에서만  $0.95 \mu\text{g/g}$  수준으로 확인되었다. 본 연구에서 이들 화합물은 일부 김치 시료에서 선택적으로 검출되었으며, 이는 김치 유형별로 원료 조성, 발효 상태 및 황 함유 화합물의 전환

**Table 2.** Composition of volatile sulfur compounds in 11 types of *kimchi* (µg/g)

| Compound                                                         | RI <sup>1)</sup> | RI <sup>2)</sup> | Mustard<br>leaf<br><i>kimchi</i> | Diced<br>radish<br><i>kimchi</i> | <i>Nabak</i><br><i>kimchi</i> | <i>Dong-</i><br><i>chimi</i>    | White<br><i>kimchi</i>       | Cucumber<br><i>kimchi</i>    | <i>Chonggak</i><br><i>kimchi</i> | <i>Godeul-</i><br><i>ppaegi</i><br><i>kimchi</i> | Napa<br>cabbage<br><i>kimchi</i> | Young<br>radish<br><i>kimchi</i> | Green<br>onion<br><i>kimchi</i> |
|------------------------------------------------------------------|------------------|------------------|----------------------------------|----------------------------------|-------------------------------|---------------------------------|------------------------------|------------------------------|----------------------------------|--------------------------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|---------------------------------|
| Mercaptans                                                       |                  |                  |                                  |                                  |                               |                                 |                              |                              |                                  |                                                  |                                  |                                  |                                 |
| Methanethiol <sup>3)</sup>                                       | < 700            | -                | ND <sup>4)</sup>                 | ND                               | ND                            | 2.10 ±<br>0.00 <sup>5),6)</sup> | 0.25 ±<br>0.07 <sup>c</sup>  | ND                           | 1.40 ±<br>0.28 <sup>b</sup>      | ND                                               | ND                               | ND                               | ND                              |
| Propyl mercaptan <sup>3)</sup>                                   | 831              | 883              | ND                               | ND                               | ND                            | ND                              | ND                           | ND                           | ND                               | ND                                               | ND                               | ND                               | 7.30 ±<br>1.70 <sup>a</sup>     |
| Allyl mercaptan <sup>7)</sup>                                    | 883              | 879              | ND                               | ND                               | ND                            | 1.59 ±<br>0.04 <sup>a</sup>     | 1.74 ±<br>0.17 <sup>b</sup>  | ND                           | ND                               | ND                                               | ND                               | ND                               | ND                              |
| Monosulfides                                                     |                  |                  |                                  |                                  |                               |                                 |                              |                              |                                  |                                                  |                                  |                                  |                                 |
| Propylene sulfide <sup>7)</sup>                                  | 884              | 875              | ND                               | ND                               | ND                            | ND                              | ND                           | ND                           | ND                               | 1.42 ±<br>0.07 <sup>b</sup>                      | ND                               | ND                               | 3.97 ±<br>0.62 <sup>a</sup>     |
| Allyl methyl sulfide <sup>7)</sup>                               | 953              | 943              | 3.14 ±<br>0.28 <sup>b</sup>      | 2.21 ±<br>0.07 <sup>b</sup>      | 0.39 ±<br>0.00 <sup>c</sup>   | 0.98 ±<br>0.14 <sup>c</sup>     | 0.78 ±<br>0.00 <sup>c</sup>  | 0.59 ±<br>0.00 <sup>c</sup>  | 4.70 ±<br>0.55 <sup>a</sup>      | ND                                               | 2.99 ±<br>0.76 <sup>b</sup>      | ND                               | 0.69 ±<br>0.14 <sup>c</sup>     |
| Diallyl sulfide <sup>7)</sup>                                    | 1,147            | 1,148            | 1.26 ±<br>0.14 <sup>bc</sup>     | 0.44 ±<br>0.07 <sup>cd</sup>     | 0.29 ±<br>0.00 <sup>d</sup>   | 0.34 ±<br>0.07 <sup>d</sup>     | 0.29 ±<br>0.00 <sup>d</sup>  | 0.19 ±<br>0.00 <sup>d</sup>  | 1.65 ±<br>0.27 <sup>b</sup>      | 0.24 ±<br>0.07 <sup>d</sup>                      | 1.55 ±<br>0.27 <sup>b</sup>      | 2.67 ±<br>0.62 <sup>a</sup>      | 0.44 ±<br>0.07 <sup>cd</sup>    |
| Disulfides                                                       |                  |                  |                                  |                                  |                               |                                 |                              |                              |                                  |                                                  |                                  |                                  |                                 |
| Dimethyl disulfide <sup>7)</sup>                                 | 1,072            | 1,071            | 4.53 ±<br>1.25 <sup>b</sup>      | 11.72 ±<br>0.14 <sup>a</sup>     | 1.58 ±<br>0.14 <sup>cd</sup>  | 3.05 ±<br>0.42 <sup>bc</sup>    | 1.82 ±<br>0.07 <sup>cd</sup> | 3.25 ±<br>0.14 <sup>bc</sup> | 13.25 ±<br>1.46 <sup>a</sup>     | ND                                               | 2.76 ±<br>0.70 <sup>bc</sup>     | 1.23 ±<br>0.07 <sup>cd</sup>     | 1.03 ±<br>0.07 <sup>cd</sup>    |
| Methyl propyl disulfide <sup>7)</sup>                            | 1,236            | 1,242            | ND                               | 0.68 ±<br>0.00 <sup>d</sup>      | 1.26 ±<br>0.00 <sup>b</sup>   | 0.49 ±<br>0.00 <sup>d</sup>     | 0.49 ±<br>0.00 <sup>d</sup>  | 4.27 ±<br>0.00 <sup>a</sup>  | 0.97 ±<br>0.00 <sup>c</sup>      | ND                                               | 0.63 ±<br>0.07 <sup>d</sup>      | ND                               | 1.41 ±<br>0.21 <sup>b</sup>     |
| ( <i>E</i> )-1-Methyl-2-(prop-1-en-1-yl)disulfane <sup>3)</sup>  | 1,271            | -                | ND                               | ND                               | ND                            | ND                              | ND                           | 1.60 ±<br>0.00 <sup>cd</sup> | 17.85 ±<br>0.64 <sup>a</sup>     | ND                                               | 4.45 ±<br>0.92 <sup>c</sup>      | ND                               | 11.90 ±<br>2.12 <sup>b</sup>    |
| Allyl methyl disulfide <sup>7)</sup>                             | 1,286            | 1,281            | 8.01 ±<br>0.89 <sup>a</sup>      | 1.62 ±<br>0.25 <sup>cde</sup>    | 2.39 ±<br>0.19 <sup>cd</sup>  | 0.95 ±<br>0.06 <sup>de</sup>    | 0.86 ±<br>0.06 <sup>de</sup> | 2.48 ±<br>0.06 <sup>cd</sup> | 7.02 ±<br>0.38 <sup>a</sup>      | 0.32 ±<br>0.06 <sup>e</sup>                      | 4.46 ±<br>0.95 <sup>b</sup>      | 2.84 ±<br>0.57 <sup>bc</sup>     | 2.30 ±<br>0.45 <sup>cd</sup>    |
| ( <i>Z</i> )-1-Methyl-2-(prop-1-en-1-yl)disulfane <sup>3)</sup>  | 1,294            | 1,303            | 15.90 ±<br>1.27 <sup>a</sup>     | 1.55 ±<br>0.21 <sup>d</sup>      | ND                            | ND                              | ND                           | 8.55 ±<br>0.07 <sup>b</sup>  | ND                               | ND                                               | ND                               | ND                               | 4.85 ±<br>0.35 <sup>b</sup>     |
| Dipropyl disulfide <sup>7)</sup>                                 | 1,385            | 1,387            | ND                               | ND                               | 1.32 ±<br>0.07 <sup>bc</sup>  | ND                              | ND                           | 2.74 ±<br>0.00 <sup>b</sup>  | ND                               | ND                                               | ND                               | ND                               | 9.46 ±<br>2.29 <sup>a</sup>     |
| ( <i>Z</i> )-1-(Prop-1-en-1-yl)-2-propyl disulfane <sup>3)</sup> | 1,427            | -                | ND                               | ND                               | ND                            | ND                              | ND                           | ND                           | ND                               | ND                                               | ND                               | ND                               | 4.00 ±<br>1.13 <sup>a</sup>     |
| Allyl propyl disulfide <sup>7)</sup>                             | 1,440            | 1,436            | ND                               | 0.62 ±<br>0.00 <sup>d</sup>      | 0.75 ±<br>0.06 <sup>bc</sup>  | 0.62 ±<br>0.00 <sup>d</sup>     | 0.62 ±<br>0.00 <sup>d</sup>  | 0.70 ±<br>0.00 <sup>cd</sup> | 0.84 ±<br>0.06 <sup>ab</sup>     | 0.35 ±<br>0.00 <sup>e</sup>                      | 0.62 ±<br>0.00 <sup>d</sup>      | 0.70 ±<br>0.00 <sup>cd</sup>     | 0.92 ±<br>0.06 <sup>a</sup>     |
| ( <i>E</i> )-1-Propenyl propyl disulfide <sup>3)</sup>           | 1,450            | 1,446            | ND                               | ND                               | ND                            | ND                              | ND                           | 2.35 ±<br>0.21 <sup>a</sup>  | ND                               | ND                                               | ND                               | ND                               | ND                              |
| ( <i>E</i> )-1-(Prop-1-en-1-yl)-2-propyl disulfane <sup>3)</sup> | 1,451            | -                | ND                               | ND                               | ND                            | ND                              | ND                           | ND                           | ND                               | ND                                               | ND                               | ND                               | 12.80 ±<br>2.69 <sup>a</sup>    |
| Diallyl disulfide <sup>7)</sup>                                  | 1,491            | 1,489            | 5.64 ±<br>0.21 <sup>ab</sup>     | 0.93 ±<br>0.07 <sup>cd</sup>     | 1.76 ±<br>0.14 <sup>c</sup>   | 0.59 ±<br>0.00 <sup>cd</sup>    | 0.59 ±<br>0.00 <sup>cd</sup> | 0.88 ±<br>0.00 <sup>cd</sup> | 6.13 ±<br>0.49 <sup>a</sup>      | 0.54 ±<br>0.07 <sup>cd</sup>                     | 3.97 ±<br>1.32 <sup>b</sup>      | ND                               | 1.23 ±<br>0.21 <sup>cd</sup>    |
| ( <i>E</i> )-1-Allyl-2-(prop-1-en-1-yl) disulfane <sup>3)</sup>  | 1,496            | -                | 35.30 ±<br>8.77 <sup>a</sup>     | 3.45 ±<br>0.07 <sup>b</sup>      | ND                            | ND                              | ND                           | 0.85 ±<br>0.21 <sup>b</sup>  | 3.55 ±<br>0.49 <sup>b</sup>      | 0.45 ±<br>0.07 <sup>b</sup>                      | 1.45 ±<br>0.07 <sup>b</sup>      | 3.65 ±<br>0.78 <sup>b</sup>      | 6.70 ±<br>1.41 <sup>b</sup>     |
| ( <i>Z</i> )-1-Allyl-2-(prop-1-en-1-yl) disulfane <sup>3)</sup>  | 1,498            | -                | ND                               | ND                               | ND                            | ND                              | ND                           | 6.25 ±<br>0.35 <sup>c</sup>  | 62.10 ±<br>3.82 <sup>a</sup>     | 2.75 ±<br>0.35 <sup>c</sup>                      | 25.70 ±<br>7.50 <sup>b</sup>     | ND                               | 19.30 ±<br>3.96 <sup>b</sup>    |
| 1-(Methylthiopropyl) methyl disulfide <sup>3)</sup>              | 1,754            | -                | ND                               | ND                               | ND                            | ND                              | ND                           | 1.45 ±<br>0.07 <sup>a</sup>  | ND                               | ND                                               | ND                               | ND                               | ND                              |
| Trisulfides                                                      |                  |                  |                                  |                                  |                               |                                 |                              |                              |                                  |                                                  |                                  |                                  |                                 |
| Dimethyl trisulfide <sup>7)</sup>                                | 1,394            | 1,398            | 75.26 ±<br>5.68 <sup>a</sup>     | 17.79 ±<br>1.18 <sup>c</sup>     | ND                            | ND                              | ND                           | 8.13 ±<br>0.00 <sup>cd</sup> | 47.48 ±<br>7.55 <sup>b</sup>     | ND                                               | 1.81 ±<br>1.04 <sup>d</sup>      | ND                               | 4.56 ±<br>3.26 <sup>d</sup>     |
| Methyl propyl trisulfide <sup>7)</sup>                           | 1,551            | 1,544            | ND                               | ND                               | ND                            | ND                              | ND                           | 2.20 ±<br>0.00 <sup>b</sup>  | 2.23 ±<br>0.04 <sup>ab</sup>     | ND                                               | ND                               | ND                               | 2.25 ±<br>0.00 <sup>a</sup>     |

(continued)

| Compound                                        | RI <sup>3)</sup> | RI <sup>4)</sup> | Mustard<br>leaf<br>kimchi | Diced<br>radish<br>kimchi | Nabak<br>kimchi          | Dong-<br>chimi           | White<br>kimchi          | Cucumber<br>kimchi | Chonggak<br>kimchi | Godeul-<br>ppaegi<br>kimchi | Napa<br>cabbage<br>kimchi | Young<br>radish<br>kimchi | Green<br>onion<br>kimchi |
|-------------------------------------------------|------------------|------------------|---------------------------|---------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------|--------------------|-----------------------------|---------------------------|---------------------------|--------------------------|
| Dipropyl trisulfide <sup>7)</sup>               | 1,662            | 1,672            | ND                        | ND                        | ND                       | ND                       | ND                       | ND                 | ND                 | ND                          | ND                        | ND                        | 1.57 ± 0.00 <sup>a</sup> |
| Isothiocyanates                                 |                  |                  |                           |                           |                          |                          |                          |                    |                    |                             |                           |                           |                          |
| Allyl isothiocyanate <sup>7)</sup>              | 1,365            | 1,369            | 35.09 ± 1.83 <sup>a</sup> | ND                        | ND                       | ND                       | ND                       | ND                 | ND                 | ND                          | ND                        | ND                        | ND                       |
| 3-Butenyl isothiocyanate <sup>7)</sup>          | 1,464            | 1,479            | 0.67 ± 0.00 <sup>a</sup>  | ND                        | ND                       | ND                       | 0.19 ± 0.00 <sup>b</sup> | ND                 | ND                 | ND                          | ND                        | ND                        | ND                       |
| Hexyl isothiocyanate <sup>7)</sup>              | 1,598            | 1,588            | ND                        | ND                        | ND                       | 0.97 ± 0.00 <sup>a</sup> | ND                       | ND                 | ND                 | ND                          | ND                        | ND                        | ND                       |
| 3-Methylthiopropyl isothiocyanate <sup>7)</sup> | 2,029            | 2,030            | ND                        | ND                        | ND                       | 1.86 ± 0.00 <sup>a</sup> | ND                       | ND                 | ND                 | ND                          | ND                        | ND                        | ND                       |
| Erucin <sup>7)</sup>                            | 2,173            | 2,183            | ND                        | ND                        | ND                       | 6.81 ± 0.07 <sup>a</sup> | ND                       | ND                 | ND                 | ND                          | ND                        | ND                        | ND                       |
| trans-Raphasatin <sup>3)</sup>                  | 2,244            | -                | ND                        | ND                        | ND                       | 0.20 ± 0.00 <sup>a</sup> | ND                       | ND                 | ND                 | ND                          | ND                        | ND                        | ND                       |
| Phenethyl isothiocyanate <sup>7)</sup>          | 2,263            | 2,260            | 5.79 ± 1.19 <sup>a</sup>  | ND                        | 1.68 ± 0.00 <sup>b</sup> | 1.73 ± 0.07 <sup>b</sup> | 1.68 ± 0.00 <sup>b</sup> | ND                 | ND                 | ND                          | ND                        | ND                        | ND                       |
| Sulfur-containing heterocycles                  |                  |                  |                           |                           |                          |                          |                          |                    |                    |                             |                           |                           |                          |
| 2,4-Dimethylthiophene <sup>7)</sup>             | 1,260            | 1,253            | ND                        | ND                        | ND                       | ND                       | ND                       | ND                 | ND                 | ND                          | ND                        | ND                        | 0.29 ± 0.00 <sup>a</sup> |
| 4-Ethyl-5-methylthiazole <sup>3)</sup>          | 1,549            | 1,539            | ND                        | ND                        | ND                       | ND                       | 8.50 ± 0.99 <sup>a</sup> | ND                 | ND                 | ND                          | ND                        | ND                        | ND                       |
| 1-Cyano-4,5-epithiopentane <sup>3)</sup>        | 1,549            | -                | ND                        | ND                        | 5.25 ± 0.21 <sup>a</sup> | ND                       | ND                       | ND                 | ND                 | ND                          | ND                        | ND                        | ND                       |
| 3-Vinyl-1,2-dithiacyclohex-4-ene <sup>3)</sup>  | 1,770            | -                | ND                        | ND                        | ND                       | ND                       | ND                       | ND                 | ND                 | 0.80 ± 0.00 <sup>b</sup>    | ND                        | ND                        | 1.50 ± 0.28 <sup>a</sup> |
| Others                                          |                  |                  |                           |                           |                          |                          |                          |                    |                    |                             |                           |                           |                          |
| Carbon disulfide <sup>3)</sup>                  | 724              | 724              | ND                        | ND                        | ND                       | ND                       | ND                       | ND                 | ND                 | ND                          | ND                        | ND                        | 0.95 ± 0.07 <sup>a</sup> |

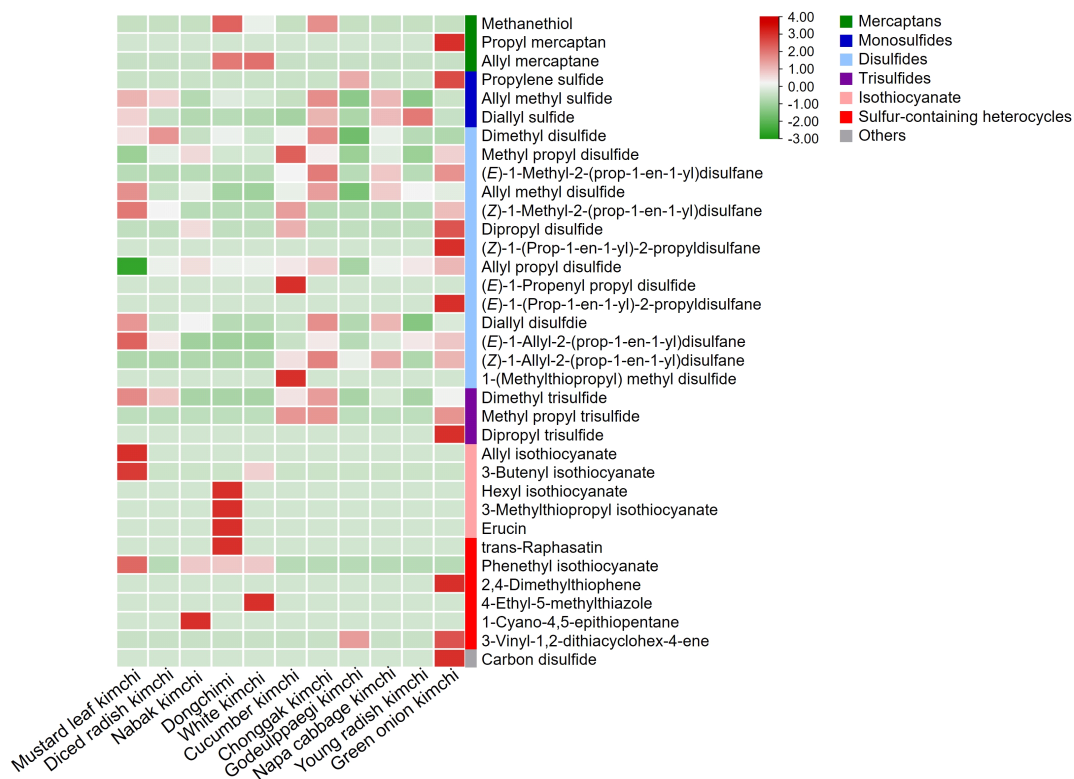
<sup>1)</sup>Retention index calculated on DB-WAX capillary column.<sup>2)</sup>Literature retention index.<sup>3)</sup>Semi-quantified relative to the internal standard.<sup>4)</sup>ND, not detected.<sup>5)</sup>All values are mean ± SD (n = 2).<sup>6)</sup>Different letters (<sup>a-c</sup>) in the same row indicate statistically significant difference (Tukey's HSD test, p < 0.05).<sup>7)</sup>Quantified using calibration curves of authentic standards.

양상이 서로 다를 수 있음을 시사한다.

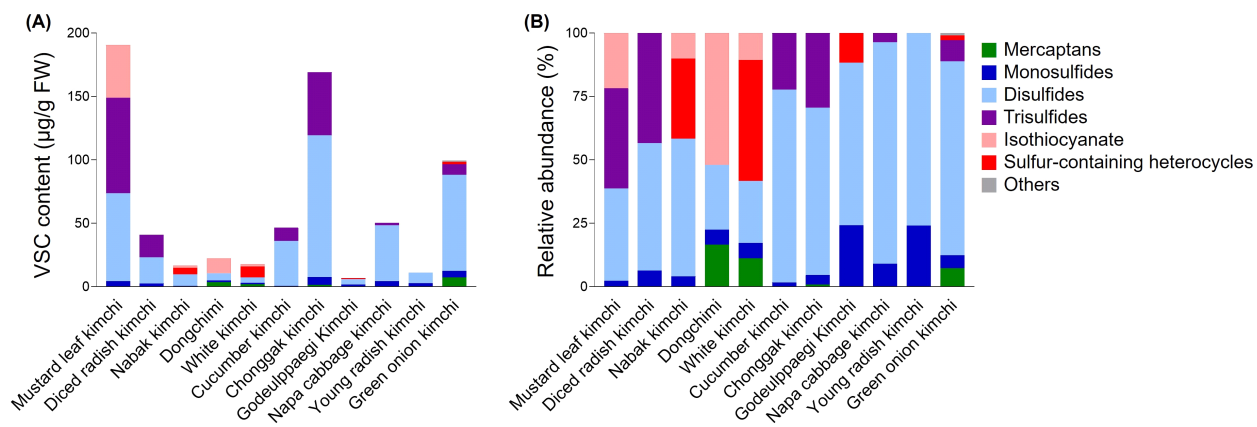
이러한 VSCs의 함량 차이는 각 김치류 고유의 주원료 채소 및 황 함유 전구체 조성의 차이뿐만 아니라, 개별 시료의 발효 단계, 저장 기간 및 부재료 배합비 등 통제되지 않은 복합적인 변수들이 함께 반영된 결과로 해석된다. 또한 VSCs의 조성은 발효 과정에서의 미생물 활성에 의해서도 영향을 받을 수 있는 것으로 보고되어 있어(Hong 등, 2016) 이러한 요인 역시 시료 간 차이에 일부 기여했을 가능성이 있다.

### 3.2. 김치 내 VSCs군의 분포

김치 11종의 VSCs 조성을 분석한 결과는 Fig. 2에 제시하였다. 김치 종류별 VSCs의 총 함량을 비교한 결과, 갓김치(190.59 µg/g)에서 가장 높은 수준을 보였으며, 총각김치(169.16 µg/g)와 파김치(99.40 µg/g)가 그 뒤를 이었다. 반면, 고들빼기김치(6.87 µg/g)와 열무김치(11.09 µg/g)에서는 상대적으로 낮은 VSCs 함량이 확인되었다. VSCs의 조성 비율을 비교한 결과, 갓김치, 깍두기, 나박김치, 오이소박이, 총각김치, 고들빼기김치, 배추김치, 열무김치 및 파김치에서는 disulfide류가 가장 큰 비중을 차지하여, 대부분의 김치 시료에서 VSCs의 주요 성분



**Fig. 1.** Heatmap of volatile sulfur compound profiles across 11 types of *kimchi*.



**Fig. 2.** Comparison of volatile sulfur compound (VSC) profiles among 11 types of *kimchi*. (A), total VSC content; (B), relative abundance of VSC groups.

으로 확인되었다. Trisulfide류는 갓김치, 깍두기, 오이소박이 및 총각김치에서 상대적으로 높은 기여도를 보여, 해당 김치의 VSCs 프로파일 형성에 중요한 역할을 하는 것으로 나타났다. 반면, isothiocyanate류는 갓김치, 나박김치, 동치미, 백김치에서만 검출되었다. 나박김치와 백김치에서는 sulfur-containing heterocycle류의 상대적 기여도가 높게 나타났으며, 고들빼기

김치, 배추김치 및 열무김치에서는 monosulfide류의 기여가 다른 김치에 비해 높은 경향을 보였다. Mercaptan류는 전반적으로 낮은 비중을 차지하였으나, 동치미, 백김치, 파김치에서 상대적으로 높은 기여도를 보였다. 특히, diallyl sulfide와 allyl methyl disulfide는 모든 김치 시료에서 공통적으로 검출되어, 본 연구에서 분석한 김치 시료 전반에 걸쳐 공통적으로 확인되

는 주요 VSCs 성분으로 나타났다.

### 3.3. 김치 내 VSCs의 다변량 통계분석

PCA는 다차원의 데이터를 저차원으로 축소하여 변수 간의 상관성을 시각적으로 파악하고, 데이터 패턴을 규명하기 위한 분석법이다(Byun과 Choi, 2014). 본 연구에서는 김치 11종의 VSCs 특성 차이를 비교하기 위해 PCA를 수행하였으며 그 결과는 Fig. 3A에 나타내었다. PCA 분석 결과, F1과 F2는 각각 43.01%와 29.94%의 설명력을 나타내어 총 72.94%의 변동이 설명되었다. F1축에서는 disulfide 및 monosulfide류가 양의 방향에 주로 기여한 반면, sulfur-containing heterocycle 화합물은 음의 방향에 기여하는 양상을 나타내어 sulfide 계열 화합물과 heterocycle 화합물 간의 조성 차이가 시료 간 분리에 반영된 것으로 나타났다. 또한 F2 축에서는 mercaptan류 및 기타 화합물이 양의 방향에 기여한 반면, isothiocyanate 및 trisulfide류가 음의 방향에 기여하는 경향을 보여 저분자 VSCs와 isothiocyanate 계열 화합물 간의 조성 차이가 시료 간 분포에 영향을 미친 것으로 해석된다. 이러한 변수 기여 특성은 시료 간 분포와 밀접한 관련성을 보였으며, F1 축의 양의 방향에 위치한 파김치, 배추김치, 총각김치 및 갓김치는 sulfide 계열 화합물과의 관련성이 높은 것으로 나타났다. 특히, 파김치는 제1사분면 상단에 위치하여 mercaptan류 및 기타 화합물과 높은 상관성을 나타내었으며, 이는 propyl mercaptan과 carbon disulfide의 높은 함량에 기인한 것으로 해석된다. 반면, 갓김치는 제4사분면 하단에 위치하여 isothiocyanate 및 trisulfide류와 밀접한 관련성을 나

타내었으며, allyl isothiocyanate와 dimethyl trisulfide의 영향이 반영된 것으로 해석된다. 또한 총각김치는 monosulfide 및 disulfide류와 인접한 영역에 분포하여 해당 화합물군과의 관련성이 높은 것으로 확인되었다. 한편, 음의 방향에 위치한 나머지 시료들은 특정 화합물군과의 뚜렷한 연관성이 나타나지 않아 상대적으로 구분이 명확하지 않은 것으로 나타났다.

HCA는 데이터 간의 유사성을 기반으로 시료를 분류하고 시각적으로 확인하는 데 유용한 통계 기법이다(Granato 등, 2018). 김치 종류별 VSCs 조성의 유사성을 평가하기 위해 수행한 HCA 분석 결과는 Fig. 3B에 제시하였다. HCA 분석 결과, 김치 시료들은 크게 세 개의 군집으로 분류되었다. 제1군집에는 파김치, 고들빼기김치, 총각김치, 배추김치가 포함되었다. 고들빼기김치는 VSCs 총 함량이 낮음에도 불구하고, 파김치와 가장 가까이 위치하였는데 이는 두 시료에서만 공통적으로 propylene sulfide와 3-vinyl-1,2-dithiacyclohex-4-ene이 검출되어 VSCs 조성의 유사성이 반영된 것으로 보인다. 제2군집은 오이소박이, 갓김치, 깍두기로 구성되었다. 세 시료에서는 dimethyl trisulfide가 공통적으로 높게 검출된 특징으로 인해 군집을 형성한 것으로 보인다. 제3군집은 나박김치, 열무김치, 동치미, 백김치로 구성되었다. 이들은 국물이 많은 형태의 물김치류로, disulfide나 trisulfide와 같은 다황화물(polysulfides)의 비율과 VSCs 총 함량이 전반적으로 낮은 특성을 공유하였다. 이러한 군집 분류는 김치 원료 및 제조 특성에 따른 VSCs 조성 차이를 반영한 결과로 해석된다. 본 연구의 다변량 통계분석 결과는 앞서 제시한 개별 VSCs의 생성 특성과의 연결될 수 있다. Sulfide

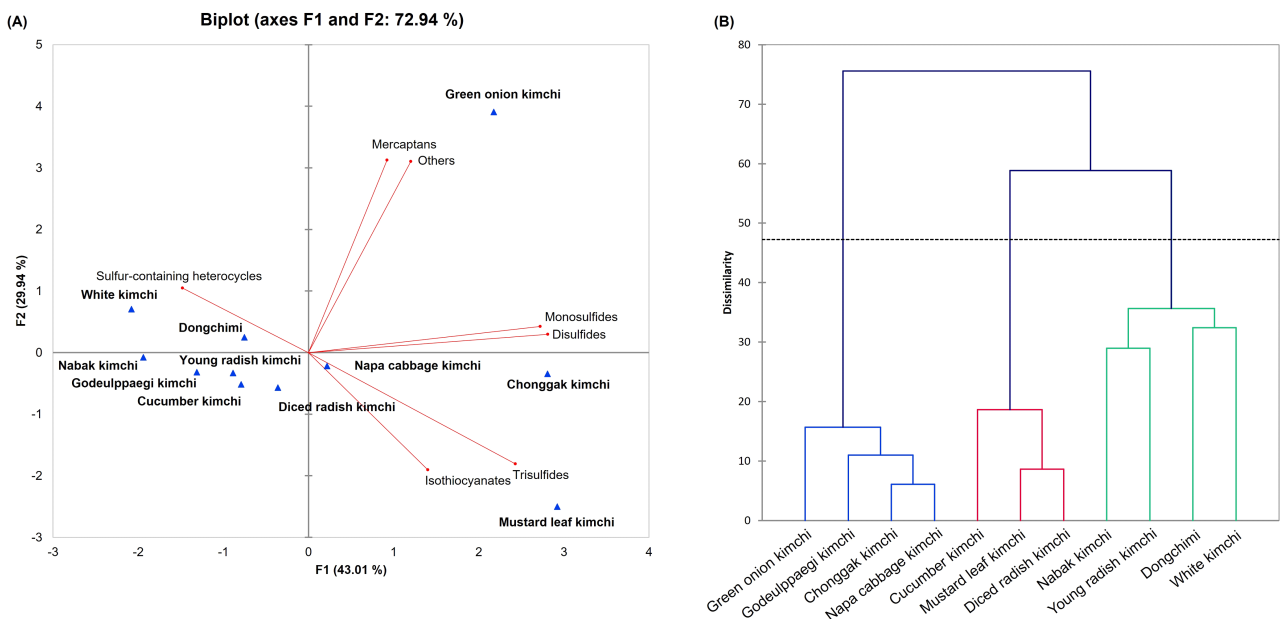


Fig. 3. Multivariate analysis of VSC profiles in 11 types of kimchi. (A), PCA biplot; (B), HCA dendrogram.

류와 관련성이 높은 시료들은 *Allium* 유래 황 함유 전구체의 전환 산물과 관련된 특성을 보였으며, isothiocyanate류와 높은 관련성을 보인 갓김치는 십자화과 채소의 glucosinolate 유래 화합물 형성 특성을 반영한 것으로 해석된다. 따라서 PCA 및 HCA에서 관찰된 시료 간 분포 차이는 단순한 VSCs의 총 함량의 차이뿐만 아니라, 김치 원료별 황 함유 전구체 조성과의 전환 경로의 차이가 복합적으로 반영된 결과로 판단된다. 다만, 본 연구에서 나타난 VSCs 프로파일은 제한된 시료를 대상으로 도출된 결과이므로, 동일한 김치 유형이라도 제조사, 지역, 절임 조건 및 발효 환경 등에 따라 세부적인 성분 조성이 달라질 수 있다. 또한 본 연구는 각 시료당 2회의 분석 반복을 기반으로 수행되었으므로, 결과를 각 김치 유형의 보편적인 특성으로 일반화하기 보다는 전반적인 군집 경향성을 파악하는데 의의가 있다. 따라서 향후 다수의 시료와 충분한 반복수를 확보하여 본 연구 결과를 검증하는 후속 연구가 필요할 것으로 사료된다.

## 4. 요약

본 연구에서는 한국에서 주로 소비되는 김치 11종을 대상으로 HS-SPME/GC-MS 분석을 통해 VSCs의 조성 및 분포 특성을 비교·분석하였다. 총 35종의 VSCs가 동정되었으며, 김치 종류에 따라 VSCs의 총 함량과 성분군 조성에서 유의한 차이가 확인되었다. 대부분의 김치에서는 disulfide류가 주요 성분군으로 나타났다. 다변량 통계분석 결과, 김치 시료들은 VSCs 조성 특성에 따라 구분되는 경향을 보였으며, 이는 김치 제조에 사용되는 원료 채소의 종류와 황 함유 전구체 조성 차이가 VSCs 프로파일에 반영된 결과로 해석될 수 있다. 또한 diallyl sulfide와 allyl methyl disulfide는 모든 김치 시료에서 공통적으로 검출되어, 김치류 전반에 걸쳐 형성되는 대표적인 VSCs로 확인되었다. 다만, 본 연구에 사용된 시료는 개별 김치의 구체적인 부재료 배합비, 원료의 산지 및 정확한 발효 단계 등의 세부 제조 변수가 통제되거나 확인되지 않았다는 한계가 있다. 따라서 본 연구의 결과를 각 김치 품목 전체의 보편적인 특성이나 절대적인 분류 기준으로 확대 해석하기보다는, 다양한 김치류의 VSCs 프로파일과 전반적인 군집 경향성을 탐색적으로 비교한 기초 연구로 접근할 수 있다. 향후 구체적인 레시피와 숙성 조건이 통제된 다수의 시료와 충분한 반복수를 통한 추가 검증이 요구된다. 본 연구 결과는 다양한 김치 유형 간 VSCs 조성을 비교함으로써 김치의 VSCs 특성 이해를 위한 기초 자료를 제공하며, 향후 품질 특성 평가 및 원료 기반 차별화 연구에 활용 가능한 정보를 제시한다.

## Funding

This study was carried out with the support of “Cooperative

Research Program for Agriculture Science and Technology Development (Project No. RS-2022-RD010244)” Rural Development Administration, Republic of Korea.

## Acknowledgements

None.

## Conflict of interests

The authors declare no potential conflicts of interest.

## Author contributions

Conceptualization: Kim HW, Sung J. Methodology: Lee H, Park S. Writing - original draft: Kim K. Writing - review & editing: Kim K, Sung J.

## Ethics approval

This article does not require IRB/IACUC approval because there are no human and animal participants.

## ORCID

Keono Kim (First author)

<https://orcid.org/0000-0003-0838-3467>

Hyeongyu Lee

<https://orcid.org/0009-0002-7397-3850>

Samuel Park

<https://orcid.org/0000-0002-6571-5280>

Heon-Woong Kim

<https://orcid.org/0000-0002-8517-4709>

Jeehye Sung (Corresponding author)

<https://orcid.org/0000-0002-7998-3016>

## References

- Byun HG, Choi JS. Real-time visualization techniques for sensor array patterns using PCA and Sammon mapping analysis. *J Sensor Sci Technol*, 23, 99-104 (2014)
- Chen C, Wu Y, Li J, Wang X, Zeng Z, Xu J, Liu Y, Feng J, Chen H, He Y, Xia R. TBtools-II: A “one for all, all for one” bioinformatics platform for biological big-data mining. *Mol Plant*, 16, 1733-1742 (2023)
- Chen L, Capone DL, Jeffery DW. Analysis of potent odour-active volatile thiols in foods and beverages with a focus on wine. *Molecules*, 24, 2472 (2019)
- Cho YS, Park SK, Chun SS, Park JR. Analysis of isothiocyanates in Dolsan leaf mustard (*Brassica juncea*). *J Korean Soc Food Cult*, 8, 147-151 (1993)
- Choi JM, Cho EJ, Kim HY, Lee AY, Choi JS.

- Physicochemical characteristics and antioxidant activity of *kimchi* during fermentation. *J Appl Biol Chem*, 65, 321-327 (2022)
- Choi YJ, Lim JY, Ko DY, Ku KM, Lee MJ, Park SJ, Yang JH, Chung YB, Park SH, Min SG, Lee MA. Effects of pretreated garlic on bacterial composition and metabolite profiles during *kimchi* fermentation. *LWT-Food Sci Technol*, 193, 115772 (2024)
- Gao S, Liu X, Liu Y, Cao B, Chen Z, Xu K. Comparison of the effects of LED light quality combination on growth and nutrient accumulation in green onion (*Allium fistulosum* L.). *Protoplasma*, 258, 753-763 (2021)
- Granato D, Santos JS, Escher GB, Ferreira BL, Maggio RM. Use of principal component analysis (PCA) and hierarchical cluster analysis (HCA) for multivariate association between bioactive compounds and functional properties in foods: A critical perspective. *Trends Food Sci Technol*, 72, 83-90 (2018)
- Hong SP, Lee EJ, Kim YH, Ahn DU. Effect of fermentation temperature on the volatile composition of *kimchi*. *J Food Sci*, 81, C2623-C2629 (2016)
- Hwang YK, Yu YS, Park HR. Quality characteristics and antioxidant of white pan bread added with *Allium fistulosum* root powder. *Culin Sci Hosp Res*, 29, 49-61 (2023)
- Kang MJ, Kang JR, Kim DG, Shin JH. Chemical characteristics and antioxidant activity of garlic extract from different ethanol solution. *J Korean Soc Food Nutr*, 47, 895-903 (2018)
- Kim HR, Cho JH, Kim JS, Lee IS. Quality changes of mustard leaf (*Dolsanggat*) *kimchi* during low temperature storage. *Korean J Food Sci Technol*, 38, 609-614 (2006)
- Kim K, Park M, Kwon D, Wang Y, Sung J. Antioxidant and flavor properties of different apple cultivars grown in Korea. *Food Chem X*, 32, 103263 (2025)
- Kim YS, Seo HY, No KM, Shim SL, Yang SH, Park ER, Kim KS. Comparison of volatile organic components in fresh and freeze dried garlic. *J Korean Soc Food Nutr*, 34, 885-891 (2005)
- Ko MO, Ko JY, Kim MB, Lim SB. Antibacterial activity of isothiocyanates from cruciferous vegetables against pathogenic bacteria in olive flounder. *Korean J Food Preserv*, 22, 886-892 (2015)
- Lee SY, Jeong SJ, Ryu MS, Ha G, Noh Y, Jeong DY, Yang YJ. Comparative physicochemical characteristics and microbial communities in commercial *kimchi* and mukeunji products. *J Life Sci*, 33, 325-333 (2023)
- Luo D, Tian B, Li J, Zhang W, Bi S, Fu B, Jing Y. Mechanisms underlying the formation of main volatile odor sulfur compounds in foods during thermal processing. *Compr Rev Food Sci Food Saf*, 23, e13389 (2024)
- Marcinkowska MA, Jeleń HH. Role of sulfur compounds in vegetable and mushroom aroma. *Molecules*, 27, 6116 (2022)
- Mi S, Zhang X, Wang Y, Yan F, Sang Y, Gong H, Wang X. Geographical discrimination and authentication of Chinese garlic based on multi-element, volatile and metabolomics profiling combined with chemometrics. *Food Control*, 130, 108328 (2021)
- Petropoulos S, Di Gioia F, Ntatsi G. Vegetable organosulfur compounds and their health promoting effects. *Curr Pharm Des*, 23, 2850-2875 (2017)
- Pyo YH, Kim JS, Hahn YS. Volatile compounds of mustard leaf (*Brassica juncea*) *kimchi* and their changes during fermentation. *Korean J Food Sci Technol*, 32, 56-61 (2000)
- Romeo L, Iori R, Rollin P, Bramanti P, Mazzon E. Isothiocyanates: An overview of their antimicrobial activity against human infections. *Molecules*, 23, 624 (2018)
- Rose P, Moore PK, Whiteman M, Zhu YZ. An appraisal of developments in *Allium* sulfur chemistry: Expanding the pharmacopeia of garlic. *Molecules*, 24, 4006 (2019)
- Ross ZM, O'Gara EA, Hill DJ, Sleightholme HV, Maslin DJ. Antimicrobial properties of garlic oil against human enteric bacteria: Evaluation of methodologies and comparisons with garlic oil sulfides and garlic powder. *Appl Environ Microbiol*, 67, 475-480 (2001)
- Seo WH, You Y, Baek HH. Changes in volatile flavor compounds of *kimchi* cabbage (*Brassica rapa* subsp. *pekinensis*) during salting and fermentation. *Food Sci Biotechnol*, 33, 1623-1632 (2024)
- Song HP, Shim SL, Jung IS, Kim JH, Noh KM, Seo HY, Kim DH, Kim KS. Analysis of volatile organosulfur compounds in Korean *Allium* species. *Korean J Food Preserv*, 16, 929-937 (2009)
- Song YN, Jung SY, Park SY, Kim SB, Kim JY, Park J, Cho MS. Quality characteristics of dipping sauce containing blended *kimchi*. *J Korean Soc Food Sci Nutr*, 53, 79-87 (2024)
- Sung J, Lee CJ, Kim HW. Information on dietary sulfur compounds in Korean agricultural commodities. *Food Ind Nutr*, 30, 42-48 (2025)
- Wei S, Wei L, Xie B, Li J, Lyu J, Wang S, Khan MA, Xiao X, Yu J. Characterization of volatile profile from different coriander (*Coriandrum sativum* L.) varieties via HS-SPME/GC-MS combined with E-nose analyzed by chemometrics. *Food Chem*, 457, 140128 (2024)
- Yu AN, Tan ZW, Wang FS. Mechanism of formation of sulphur aroma compounds from L-ascorbic acid and L-cysteine during the Maillard reaction. *Food Chem*, 132, 1316-1323 (2012)