

Cholesteryl Crotonate의 구조

박영자

숙명여자대학교 화학과

Cholesteryl crotonate($\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCOOC}_{27}\text{H}_{45}$)의 분자 및 결정 구조를 X-선 회절법으로 연구하였다. 결정은 $P2_1$, $a = 13.446(4) \text{ \AA}$, $b = 11.802(3) \text{ \AA}$, $c = 18.782(5) \text{ \AA}$, $\beta = 103.99(2)^\circ$, $Z = 4$ 이다. 회절 반점들의 세기는 흑연 단색화 장치가 있는 Enraf-Nonius CAD-4 diffractometer로 얻었으며($2\theta_{\max} = 25^\circ$, Mo-K α X-선($\lambda = 0.7107 \text{ \AA}$))을 사용하였다. 분자 구조는 직접법으로 풀었으며, 최소자승법으로 정밀화하였고, 최종 신뢰도 R 값은 1604개의 회절 반점에 대하여 0.092이었다.

화합물 내의 cholesterol 부분의 구조는 다른 관련 화합물에서 밝혀진 구조와 잘 일치한다. 분자들은 monolayer를 이루면서 쌓여 있으며, monolayer 중심부에서는 cholesteryl ring system들과 molecule **A**의 C(17)-side chain들이 서로 촘촘히 쌓여 있다. 층(layer)들 사이에는 crotonate tail들과 molecule **B**의 C(17)-side chain들이 느슨하게 모여있다. 이 화합물의 결정 구조는 cholesteryl ethylcarbonate, propylcarbonate, crotylcarbonate등의 결정 구조와 isostructure이다. Cholesteryl crotylcarbonate의 구조 및 열화학적 성질등을 비교 검토하고 자 한다.