

내포 화합물의 열적 안정도를 통한 숙주 분자의 이성질체 손님분자 선택성 예측

김진수, 이종협, 김우식^{1,*}
서울대학교; ¹경희대학교
(wskim@khu.ac.kr*)

본 연구에서는 손님 분자를 포함하고 있는 GTS (guanidinium *p*-toluenesulfoante) 내포 화합물들의 열적 안정도 평가를 통해, GTS 숙주 분자의 손님 분자에 대한 선택적 내포 현상을 예측하고자 하였다. DSC 열 분석 결과, 내포 화합물에 내포되어 있는 손님 분자가 숙주 분자로부터 빠져 나갈 때 필요한 에너지는 GTS(*m*-xylene)이 다른 두 내포 화합물보다 높았고, GTS(*o*-xylene)과 GTS(*p*-xylene)은 서로 비슷했다. 이것은 구조상 GTS(*m*-xylene)은 GS 층들 사이에 C-H...O 상호 작용에 의해 다른 두 내포 화합물보다 안정화 되어 있기 때문이다. 또한, 이러한 열적 안정성은 GTS 숙주 분자의 xylene 손님 분자에 대한 선택적 내포 현상과 일치하는 것을 확인할 수 있었다. 따라서, 내포 화합물의 열적 안정성 평가는, 손님 분자에 대한 숙주 분자의 선택도를 예측하는 데 유용한 수단임을 알 수 있었다.