

생촉매를 사용한 Isobutyl Butyrate 합성에 관한 반응속도 연구

손성광, 강정원, 송광호*, 김선옥¹, 최재훈²
고려대학교 화공생명공학과; ¹고려대학교 전자공학과;
²LG화학기술연구원
(khsong@korea.ac.kr*)

본 연구는 효소를 촉매로 사용한 에스테르화(Esterification) 반응의 반응속도에 관한 것으로 리파아제(Lipase)를 고정화시킨 Novozym® 435(Candida antarctica lipase B)를 촉매로 사용하였다. Novozym® 435는 리파아제 계열의 가장 일반적인 생촉매로써 다양한 유기용매 상에서 열적으로 비교적 안정하며 여러 기질에 대해 높은 활성을 갖는다. 특히 Novozyme® 435는 에스테르 합성 반응에 효과적인 생촉매로 알려져 있다. 대상 반응으로는 Butyric Acid와 iso-Butanol을 에스테르화하여 iso-Butyl Butyrate를 합성하는 것이다. 합성된 iso-Butyl Butyrate는 향기 관련 산업 분야에서 향기 보류제와 향기를 바꾸는 물질로써 사용되고 있고, 그 밖에 의약품, 화장품, 고분자의 가소제 및 용매로도 널리 사용되고 있다. 반응의 반응속도 및 메카니즘을 밝히기 위해 다양한 변수의 효과를 알아보는 실험을 수행하고 결과로 얻은 데이터를 해석하였다. 본 연구는 회분식 반응기에서 수행되었고, 용매에 반응물을 각각 같은 몰수로 넣고 물질전달이 반응속도에 영향을 주지 않는 조건하에서 반응을 시켜 높은 전환률을 얻을 수 있었다. 초기속도와 진행곡선으로부터 적당한 모델을 찾았고 반응속도는 Ping Pong bi bi 메카니즘을 따른다는 것을 알아냈다. Ping Pong bi bi 메카니즘으로부터 유도된 간단한 반응속도 모델을 Butyric Acid와 iso-Butanol의 생촉매를 사용한 에스테르화 반응을 설명하기 위해 제안하였다.