글리세롤의 산화탈수반응을 위한 이원기능촉매 개발 및 적용

윤양식, 이경록, 박홍석, 김태용, 윤다님, 서영종[1], 김왕규[1], 이중원[1], 한정우[2], 이종협*
서울대학교; [1]롯데케미칼; [2]서울시립대학교
(jyi@snu.ac.kr*)

글리세롤의 산화탈수반응은 기존 석유화학 기반의 아크릴산 생산공정을 대체할 수 있는 바이오매스 기반 공정이다. 아크릴산은 고흡수성수지의 주원료로 사용되며, 높은 시장가치로 인하여 본 대체공정에 대한 관심이 증가하는 추세다. 글리세롤로부터 아크릴산을 생산하는 반응은 탈수와 산화 반응으로 이루어진다. 이와 같은 연속반응에서는 중간물질인 아크롤레인의 독성 및 불안정성으로 인한 추가적인 분리정제 및 공정 운영 비용이 발생한다. 따라서 두 반응을 동시에 진행시킬 수 있는 이원기능 촉매의 개발 및 이를 통한 비용절감이 필요하다. 이 연구에서는 탈수반응에 효과적인 텅스텐을 선택적산화반응을 촉진할 수 있는 몰리브덴 바나듐 복합산화물과 결합시켜, 새로운 이원기능 촉매를 개발하였다. 밀도범함수이론에 기반한 계산을 통하여 텅스텐의 결합이 주위 원자들의 전자밀도를 변화시켜 아크릴산 선택도에 유리한 특성을 가짐을 확인하였다. 앞서 구현한 모델촉매의 실제 제조 및 특성분석을 통하여, 실제 촉매의 특성이 계산을 위한 모델촉매가 갖는 특성과 부합함을 확인하였다. 또한 제조된 촉매가 아크릴산의 직접생산 반응에서 높은 수율 및 높은 안정성을 보임을 확인하였다. (본 연구는 환경부 환경융합신기술 개발사업(202-091-001) 및 한국과학기술정보연구원/슈퍼컴퓨팅센터로부터 슈퍼컴퓨팅 자원과 기술지원 (KSC-2013-C1-025)에 의해 수행되었다.