

헥사노익산의 케톤화 반응의 반응경로 규명을 위한 kinetic 모델 연구

우예솔, 박명준[†], 이윤수¹, 최재욱¹, 서동진¹, 하정명¹아주대학교; ¹한국과학기술연구원(mjpark@ajou.ac.kr[†])

카르복실산(carboxylic acid)을 이용하여 케톤(ketone)을 생성하는 반응에 대하여 케텐(ketene), 카르복실산염(carboxylate), 베타 케토산(β -ketoacid), 그리고 산무수물(acid anhydride) 등이 중간체로 생성된다고 보고되었으며, 헥사노익산(hexanoic acid)을 이용한 케톤화 반응에서도 산무수물이 생성됨을 확인하였다. 본 연구에서는 케톤화 반응에서 산무수물이 반응경로에 어떠한 영향을 끼치는지 알아보기 위하여 3가지 경로를 제시하였다; 1)케톤화 반응과 무관하게 카르복실산의 탈수·이량화 반응으로 산무수물이 생성되는 경우와 2)케톤화 반응의 중간체로 산무수물이 생성되는 경우, 3)생성된 케톤과 이산화탄소가 반응하여 산무수물을 생성하는 경로. Langmuir-Hinshelwood 속도식을 기반으로 각 경로에 대하여 속도식을 유도하였다. 여러 온도 및 공간속도, 피드 조성에서 확보한 kinetic 데이터를 이용하여 각 모델의 반응속도 상수를 추정하였으며, 추정결과의 통계 결과로부터 2)번 경로, 즉 두 개의 헥사노익산이 중간체인 산무수물로 결합되며, 산무수물의 탈카르복실화 반응에 의해 케톤이 생성되는 경로가 최적 경로임을 확인하였다.