

헥사노익산의 케톤화 반응에 대한 kinetic 모델링

우예슬, 최재욱¹, 서동진¹, 하정명¹, 박명준[†]

아주대학교; ¹한국과학기술연구원

(mjpark@ajou.ac.kr[†])

헥사노익산(Hexanoic acid, HA)의 케톤화 촉매반응에 대한 기존의 kinetic은 카프론(capron, 6-Undecaone, UDO)으로 직접 전환되는 것에 초점이 맞춰져 있으며 몇몇 연구에서 케텐, 카르복실염, 베타 케토산, 그리고 산 무수물(acid anhydride) 등이 중간체로 생성이 된다고 보고되었다. 본 연구에서는 헥사노익산 무수물(Hexanoic anhydride, HAn)이 케톤화 촉매반응의 중간체로 검출된 실험 결과를 기반으로 케톤화 반응이 두 단계로 일어난다고 제안하였다. 이를 바탕으로 속도식을 개발하였으며, 여러 온도 및 공간 속도에 대하여 실험을 진행한 후 반응 kinetic 데이터를 확보하였다. 또한, kinetic pathway에서 중간체의 역할을 살펴보기 위해 HAn을 다양한 조성으로 피드에 포함하여 공급하였다. 추정된 kinetic parameter를 기반으로 한 속도식의 유효성을 검증하였으며, 모델을 통해 HA의 케톤화 반응시 HAn이 중간체로 생산된다는 것을 확인할 수 있었다. 또한, UDO 생산을 최대화하기 위한 최적의 반응 조건을 찾을 수 있었다.