

클로로포름의 탈염수소화 반응 메커니즘 및
kinetic 개발 연구

손민지, 박명준[†], 조재민¹, 이새롬¹, 배종욱¹
아주대학교; ¹성균관대학교
(mjpark@ajou.ac.kr[†])

클로로포름(CHCl_3) 탈염수소화(hydrodechlorination) 반응의 생성물은 염화메틸렌(CH_2Cl_2), 염화메틸(CH_3Cl) 및 메탄(CH_4)이며 미량의 에틸렌과 에탄 (C_2)이 생성된다. 본 연구에서 C_2 는 관찰되지 않았고, 이에 따라 클로로포름에서 염화메틸렌을 거쳐 염화메틸과 메탄이 생성되는 2단계 메커니즘을 제안하였다. 특히 기존 문헌에서는 수소가 과량인 조건(H_2/CHCl_3 비 100 이상)이기 때문에 수소의 영향을 고려하지 않았으나 본 연구에서는 상대적으로 수소비가 적은 조건이기 때문에 수소의 농도 영향을 보고자 다양한 형태의 속도식을 개발하였다. 반응 온도, 압력, 공간속도 및 반응물 조성의 변화에 따른 실험 데이터를 확보한 후, 제안된 메커니즘을 기반으로 세 가지 생성물의 생성반응을 모두 고려하였다. 수소의 반응차수 유/무와 흡착에 고려된 물질에 따른 다양한 속도식을 개발하고 속도상수를 추정된 뒤, 가장 타당한 속도식을 결정하였다. 결정된 속도식을 이용하여 운전조건에 따른 클로로포름 전환율과 생성물의 선택도를 살펴보았으며 목적생성물인 염화메틸렌의 수득률이 최대가 되는 운전조건을 결정하였다.