

## Palladium-catalyzed carbonylation of methyl 5-bromo-2-furan carboxylate for generating 2,5-furan dimethyl carboxylate

이혜진, 박소연<sup>1</sup>, 백자연<sup>1</sup>, 김용진<sup>1,†</sup>과학기술연합대학원대학교; <sup>1</sup>한국생산기술연구원(yjkim@kitech.re.kr<sup>†</sup>)

퍼퓨랄은 비식용 바이오매스 중 5 탄당인 자일로스를 탈수화하여 얻을 수 있으며 정제가 쉽다는 장점으로 현재 중국에서 대량으로 생산되고 있다. 또한, 퍼퓨랄 유래 물질인 2,5-퓨란 디메틸 카복실레이트(FDMC)는 PET를 합성하는 전구체인 석유 유래 디메틸 테레프탈레이트를 대체할 수 있는 물질로 각광받고 있다. 퍼퓨랄에서 FDMC을 얻기 위해서는 산화 반응, 할로젠화 반응, 카르보닐화 반응을 차례로 거치는 3단계 반응이 필요하다. 1 단계 반응에서 퍼퓨랄의 산화 에스테르화 반응으로 메틸 2-퓨로에이트를 얻은 후 바로 카르보닐화 반응을 진행하게 되면 퓨란 링에 결합된 수소가 높은 C-H 결합 안정성을 보여 카르보닐화 반응이 진행되기 어렵다. 따라서 할로젠이 치환된 메틸 5-할로젠-2-퓨란 카복실레이트를 카르보닐화의 반응 기질로 사용하여 반응을 수행하는 것이 용이하다. 이번 연구에서는 메틸 5-브로모-2-퓨란 카복실레이트를 기질로 이용하여 카르보닐화 반응을 통해 FDMC 합성 반응을 수행하였다. 상기 반응에 적합한 촉매 스크리닝 결과 촉매로 Pd(OAc)<sub>2</sub>, 리간드인 xantphos, 염기성 물질인 1-methylimidazole로 구성된 촉매 시스템이 가장 높은 활성을 확인했으며 최적화된 조건에서 FDMC의 수율 97%를 얻을 수 있었다. 또한, 최적화된 촉매 시스템에서 1-methyl imidazole의 역할을 규명하기 위하여 특성분석을 진행하였다.