

생촉매를 사용한 n-Butyl Butyrate 합성에 관한 반응속도 연구

손성광, 이수구, 강정원, 송광호*, 김선옥¹, 최재훈², 김지현³
고려대학교 화공생명공학과; ¹고려대학교 전기전자전파공학부; ²LG화학 기술연구원; ³
동국대학교 생명화학공학과
(khsong@korea.ac.kr*)

본 연구는 Lipase 계열의 생촉매 Candida Antarctica Lipase B(CALB)를 사용하여 n-Butyl Butyrate를 합성하는 에스테르반응(Esterification)의 반응메커니즘을 밝히고 반응속도상수를 구하는데 그 목적이 있다. 이 정보는 다양한 조건에서 수행 가능한 반응기 모델을 결정하는데 있어 매우 유용하다. 생촉매는 리파아제(Lipase)를 고정화시킨 가장 일반적이며 다양한 유기용매 상에서 열적으로 비교적 안정하여 여러 기질에 대해 높은 활성을 갖는다고 알려진 상업촉매인 Novozym® 435(Candida antarctica lipase B)를 사용하였다. 대상 반응인 에스테르화 반응시에 반응물로는 Butyric Acid와 n-Butanol을 사용하였으며, 유기용매로는 Hexane을 사용하였다. 이렇게 합성된 n-Butyl Butyrate는 향기산업 관련 분야, 의약품, 화장품, 식품산업에 널리 응용되고 있다. n-Butyl Butyrate 합성실험은 두 반응물의 농도를 다양하게 변화시켜 가면서 수행하였으며, 그 결과 본 반응은 비경쟁적인 기질의 저해작용(Inhibition)이 있는 Ping-pong bi-bi 메커니즘을 따른다는 것을 알 수 있었다. 이 메커니즘에 준하여 Parameter Estimation 과정을 거치면 Butyric Acid와 n-Butanol에 대한 각각의 반응상수와 저해상수를 결정할 수 있고 이를 바탕으로 반응물의 여러 농도 조건에서 n-Butyl Butyrate 합성반응이 어느 정도로 진행되는지 여부를 예측할 수 있게 된다.