

질산, 황산의 혼합산을 이용한 protonation 및 nitration 반응 연구

김영익, 박상태, 송광호†

고려대학교

(khsong@korea.ac.kr†)

질산화 반응은 주로 폭약(nitroguadine, trinitrotoluene)을 제조하거나 화학반응의 전구체 혹은 중간생성물을 합성하기 위해 연간 수백만 톤이 생산된다. 질산을 강한 산화제인 황산과 혼합할 경우 황산으로부터 질산으로 수소이온 ( $H^+$ )이 이동하는 protonation이 진행되며, nitronium ion이 형성된다. 형성된 nitronium ion은 알코올 및 phenol류의 aromatic compound와 반응하여 질산화 반응이 진행된다. 질산화 반응은 일반적으로 매우 빠른 발열반응으로 알려져 있으며, 반응속도를 조절하기 위해 반응물간 몰비, 반응 온도, 혼합산의 조성 등을 변화시켜 분석할 필요성이 있다. iso-ocatnol의 질산화 반응을 대상반응으로 하였으며, 이 반응의 경우 혼합산과 iso-ocatnol의 계면에서 반응이 일어나는 불균일계 반응이므로 효율적인 혼합이 반응 결과에 미치는 영향도 고려하였다. Temperature runaway 현상이 일어나지 않는 온도 범위를 확인하기 위해 모든 조건에 대해 온도 프로파일을 작성했다. 반응 결과 생성된 생성물의 양은 GC를 이용하여 정량 분석하여 전환율 및 선택도를 계산했다.