

할라이드 이온을 통한 DSHP 반응에서의 Pd의 메커니즘 규명

황승연, 한근호, 이관영[†]

고려대학교

(kylee@korea.ac.kr[†])

과산화수소 (H_2O_2)는 O_2 분자를 제외한 활성 산소 비율이 가장 높은 강력한 산화제이다. 또한 산화 후 부산물로 H_2O 분자만 생성하여 환경에 덜 유해하다. 이러한 장점으로 인해 연간 생산 및 수요가 지속적으로 증가하고 있다. 과산화수소의 상업적 대량 생산은 유해 유기 화학 물질을 순차적으로 수소화 및 산화시키는 Anthraquinone 산화 공정 (AO 공정)에 의해 운영된다. 순환 과정의 부산물로 높은 수율의 H_2O_2 를 얻을 수 있다. 복잡한 다단계 공정 및 유해 화학 물질의 큰 운영 비용으로 인해 언급된 AO 공정의 단점을 개선할 수 있는 유망한 대안으로 과산화수소의 직접 합성(DSHP)이 제안되었다.

그러나 DSHP에는 낮은 H_2O_2 선택성 및 심각한 물질 전달 제한이라는 한계점이 존재한다. 최근 연구는 주로 촉매 Activity를 향상시키고 촉매 메커니즘을 연구하는 데 중점을 두었다. 여기서 우리는 촉매의 반응 메커니즘을 다시 돌아보았다. DSHP 반응에 선택도를 높이기 위한 첨가제로서 할라이드 이온이 많이 사용된다. 하지만 이 할라이드 이온의 양이 많아지면 촉매의 활성 사이트를 막게 되고 전환율이 낮아지게 된다. 이때 알코올과 물에서의 전환율 감소 양상이 다르고, 이에 Pd이 DSHP에서 어떤 메커니즘으로 반응하는지 예측할 수 있었다. 본 연구에서는 다양한 특성 및 활동 테스트를 통해 이러한 사실과 이를 뒷받침하는 증거들을 규명하기 위해 해당 연구를 진행하였다.