

Iron complex를 이용한 포화 탄화수소의 부분산화 반응

김사희, 오승모

서울대학교 공업화학과

포화 탄화수소는 불포화 탄화수소의 경우와는 다르게 좋은 반응성과 선택성을 가지고 부분산화되기 어렵다. 그러나 oxygenase와 같은 metallo-proteins는 매우 큰 선택성을 가지고 산화물을 합성하므로, 이들과 유사한 구조와 화학적 특성을 갖는 촉매계를 도입하여 포화 탄화수소의 부분산화 반응을 시도하였다.

본 실험에서는 $\text{Fe(II)}/\text{pyridine carboxylic acid}$ 를 촉매로 하여 $\text{pyridine/acetic acid}$ 용매에서 과산화수소에 의한 cyclohexane과 adamantane의 부분산화 반응을 수행하였는데, $\text{Fe(II)}/2\text{-pyridine carboxylic acid}$ 촉매를 이용하여 50% 이상의 반응효율을 얻을 수 있었다. 또한 ligand의 종류에 따른 반응성을 조사하였다.

Cyclohexane 부분산화 반응의 경우 cyclohexanone과 cyclohexanol이 주된 생성물로 얻어졌으며, one/ol 비는 4~10 값을 가졌다. Cyclohexane 부분산화 반응의 중간체를 밝히기 위하여, 중간체로 제안된 cyclohexyl hydroperoxide를 합성하여 이것으로 부분산화 반응을 수행하였으며 다른 중간체의 가능성에 대해서도 조사하였다.

Radical 메카니즘으로 반응이 진행되는가 여부를 규명하기 위하여 adamantane의 부분산화 반응을 행하였는데, 이 경우 C_2/C_3 비가 3~4 정도의 결과를 얻을 수 있었다. 또한 여러 radical trap을 이용하여 결과를 조사하였다. 이로부터 반응이 radical 메카니즘으로 진행되지 않는다고 제안 할 수 있다.