키랄물질 분리용 SMB에 대한 수학적 모델링

한순구[1,2], 최영재[1], 정성택[1], 노경호[1,2,*]
[1]인하대학교 화학공학과;
[2]인하대학교 초정밀생물분리기술연구센터
(rowkho@inha.ac.kr*)

키랄화합물은 광학적 성질이외에 모든 물성이 동일한 화합물로써 동일한 분자식에 결합 구조가 상이한 물질이다. 이러한 특성으로 인해 인체내에서 서로 다른 활성을 보임으로써 최근 이에 대한 연구가 활발히 진행되어지고 있다. 약리활성을 가지는 키랄화합물을 제조하는데 있어서 주로 사용되어지는 방법은 크로마토그래피를 이용한 고순도 분리이다. 이중에서 회분식 크로마토그래피의 단점을 보완한 연속공정인 SMB(simulated moving bed)를 이용한 방법을 주로 사용하고 있다. 하지만, 이 경우 분리조건을 개발하는 있어서 고려하여야 할 매개변수가 많기 때문에 시간 뿐만 아니라 경제적으로 많은 비용을 요구하게 된다. 이러한 이유로 전산 모사를 통한 분리 조건의 최적화의 필요성이 대두되었다. 본 연구에서는 산부인과 국부마취제로 사용되어지는 bupivaciaine을 원료대상물질로 하여 SMB를 이용하여 고순도 연속 분리함에 있어서 상용 시뮬레이터와 수학적 알고리즘에 의한 방법으로 수행한 전산모사 결과를 비교하여 보았다. 각각의 모델링의 차이에 의한 실험값과 전산모사결과를 비교하여 보다 실험값에 정확한 수학적 모델링 방법을 찾고자 하는 것이 연구의 목적이다.