

Simulation of (R) and (S) Ketoprofen Separation in Simulated Moving Bed(SMB)

이일송, 김인호*

충남대학교

(ihkim@cnu.ac.kr*)

프로펜(profen)류는 키랄(chiral) 화합물인 의약품의 원료로 사람들의 주목을 받고 있다. 프로펜은 광학 이성질체(enantiomer) 의약품으로 약리작용은 (S)-프로펜과 (R)-프로펜 중 (S)-프로펜이 갖는 것으로 알려져 있다. 따라서 (S)-프로펜의 분리를 위해 광학 이성질체의 분리공정이 중요하다. Ketoprofen은 프로펜류 비스테로이드계열의 소염진통제로 염증 및 진통, 해열효과를 가지고 있으며 경구투약보다 주로 피부에 부착하여 투약한다. SMB는 산업적으로 광학분할에 많이 활용되는 공정으로, batch chromatography가 갖는 분리공정 중 시료의 회석 및 농축의 필요성을 해결하였으며 연속적이고 용리액의 소모량을 감소시키는 장점이 있다. 본 연구는 SMB공정이론 중 삼각형 이론(triangle theory)을 통해 조작파라미터 m_2 , m_3 를 변화시키며 용출액의 순도변화 및 유효성분인 (S)-ketoprofen의 최대순도를 찾는 것에 목적이 있다. Aspen simulator를 이용하여 전산모사를 수행하여 같은 헨리상수와 물질전달계수 조건에서 4-bed SMB와 8-bed SMB를 비교하였다. 4-bed 칼럼은 길이 200mm, 직경 10mm, 공극률 0.55이고 8-bed 칼럼은 길이 100mm, 직경 10mm 공극률 0.55로 칼럼의 총 길이는 같다. (R)-ketoprofen과 (S)-ketoprofen의 순도를 모두 고려할 때 4-bed와 8-bed 모두 m_2 , m_3 가 삼각도의 중앙인 12.0, 13.0에서 순도가 가장 높았다. (S)-ketoprofen의 경우 최대순도는 4-bed와 8-bed 모두 m_2 , m_3 가 삼각도 왼쪽 바깥인 10.9, 12.6에서 4-bed는 93.35 %, 8-bed는 96.90 %이었다.