검토 보고서 · 예시

Fully Porous → Core-Shell 컬럼 전환 검토 보고서

등용매(Isocratic) 분석법 · 분석 성능, 시간·용매·비용, 약전 허용 변경 범위 검토 · 기준 장비 HPLC 400 bar

이 문서는 맞춤 자료의 형식을 보여 드리기 위한 예시입니다. 수치는 ChromaTalk Lab Calculators의 Core-Shell Transfer 계산기에 예시 조건을 넣어 얻은 계산값이며, 특정 시료·장비에서 측정한 결과가 아닙니다.

1 검토 목적

기존에 250 × 4.6 mm, 5 µm 전다공성(Fully Porous) 컬럼으로 운용하는 등용매 분석법을 100 × 4.6 mm, 2.6 µm Core-Shell 컬럼으로 전환할 때 다음 세 가지를 검토했습니다.

· 분석 성능 — 이론단수와 분리능이 유지되거나 나아지는가

· 운영 효율 — 분석시간, 용매 사용량, 연간 비용이 얼마나 달라지는가

· 규정 적합성 — USP 〈621〉, Ph. Eur. 2.2.46, 대한민국약전의 허용 변경 범위 안인가

2 결론 요약

이론단수 (N)	분리능 (Rs) 예상	분석시간	용매 사용량	예상 연간 절감액
12% 증가	1.06배	66% 단축	66% 절감	₩25,700,769
25,000 → 27,992	선택성 동일 가정	15 → 5.1 min/런	15.0 → 5.1 mL/런	3,000런/년 기준

전환하면 이론단수는 약 12% 늘고 분석시간은 런당 9.9분(66%) 줄며, 용매 사용량은 런당 약 66% 줄어드는 것으로 계산됩니다.

USP 〈621〉 / Ph. Eur. 2.2.46 / 대한민국약전 허용 변경 범위 판정: 범위 안 (L/dp · 유속 · 온도 모두 PASS). 충전제 형태 변경(전다공성 → Core-Shell)은 조건부 허용이므로 6항의 전제를 확인해야 합니다.

3 기존 조건 대비 전환 조건

항목	기존 (Fully Porous)	전환 (Core-Shell)	변화
충전제 형태	전다공성 (Fully Porous)	Core-Shell (SPP)	
컬럼 치수 (L × ID)	250 × 4.6 mm	100 × 4.6 mm	
입자 크기 (dp)	5 µm	2.6 µm	
유속	1.00 mL/min	1.000 mL/min	거의 같음
분석시간 (Run Time)	15 min	5.1 min	66% 단축
주입량	10 µL	3.4 µL (약전 식 4.0 µL)	
컬럼 온도	30 °C	30 °C	동일
배압 (추정)	150 bar	222 bar	48% 증가
이론단수 N (추정)	25,000	27,992	12% 증가
용매 사용량 / 런	15.0 mL	5.1 mL	66% 절감

* 배압 추정값은 입력한 기존 배압 기준이며, 장비 입력 한계는 400 bar입니다.

4 기대 효과

분석 성능. 이론단수는 25,000에서 27,992로 약 12% 늘어나는 것으로 추정됩니다. 분리능은 선택성(α)과 보유계수(k)가 같다고 가정할 때 약 1.06배로 예상됩니다.

분석시간과 용매. 런당 분석시간은 15분에서 5.1분으로, 용매 사용량은 15.0 mL에서 5.1 mL로 각각 66% 줄어듭니다.

배압. 추정 배압은 150 bar에서 222 bar로 48% 늘어납니다. 검토 기준으로 삼은 장비 한계 400 bar보다 낮은 값입니다.

5 연간 비용 절감 추정 (3,000런/년 기준)

구분	절감 내역	연간 절감액
시간 (기기·인력)	런당 9.9분 단축 → 연간 496시간 확보 × 시간당 ₩50,000	₩24,807,692
용매·폐액	런당 9.9 mL 절감 → 연간 29.8 L × (용매 ₩30,000/L)	₩893,077
합계		₩25,700,769

* 연간 분석 건수, 시간당 운영비용(기기 감가상각·유지보수·소모품·인건비), 용매 단가·폐액 처리비는 계산할 때 넣은 값입니다(도구 기본값은 예시값). 실제 검토에서는 해당 실험실의 값으로 바꿔 계산합니다.

* 시간 절감은 분석시간 기준으로 re-equilibration을 제외한 보수적 추정이며, 용매는 이동상 A/B를 구분하지 않은 총량입니다.

6 허용 변경 범위 판정 — 등용매 용출

USP 〈621〉, Ph. Eur. 2.2.46, 대한민국약전 기준으로 항목별 변경 폭을 허용 범위와 대조했습니다.

항목	기존	전환	변화	허용 범위	판정
L/dp 비	50,000	38,462	−23.1%	−25% ~ +50%	PASS
유속	1.00 mL/min	1.000 mL/min	−48.0%	공식값 1.923 ±50% → 0.962 ~ 2.885 mL/min	PASS
온도	30 °C	30 °C	+0 °C	−10 ~ +10 °C	PASS
충전제 형태	Fully Porous	Core-Shell (SPP)	TPP → SPP	조건부 허용 (표면화학 유사·SST)	PASS*
컬럼 내경	4.6 mm	4.6 mm	동일	허용 (유속 공식으로 보정)	PASS
검출 파장	—	—	—	변경 불가	N/A

* 허용 범위는 대한민국약전 〔별표 5〕 일반시험법 79.4(4.2. 등용매 용출)와 USP 〈621〉·Ph. Eur. 2.2.46이 같습니다.

* L/dp = 컬럼 길이(μm) / 입자 크기(μm). USP 〈621〉 2022년 개정은 L과 dp를 비율로 관리합니다.

* 유속의 변화(%)는 공식값 $F_2 = F_1 \times (dc_2^2 \times dp_1)/(dc_1^2 \times dp_2)$ = 1.923 mL/min 대비 편차입니다. 등용매는 공식값 조정 후 ±50% 추가 조정이 허용됩니다.

* 충전제 형태의 PASS는 조건부입니다 — 치환기 동일성(예: C18 → C18), 지지체·표면화학 유사성, SST 충족, 선택성과 용출 순서 동등성 입증이 전제입니다.

* 온도 허용 범위: 등용매 ±10 °C · pH ±0.2 unit · Buffer 농도 ±10%.

7 전환할 때 확인할 사항

- 이 보고서의 수치는 계산 모델에 의한 예측값이며, 실제 결과는 시료·이동상·장비(extra-column volume 등)에 따라 달라질 수 있습니다. 전환 후 시스템 적합성(SST) 확인이 필요합니다.
- 충전제 형태 변경은 조건부 허용입니다. 치환기 동일성, 지지체·표면화학 유사성, SST 충족, 선택성과 용출 순서 동등성을 입증해야 합니다.

· 주입량은 계산값 3.4 µL와 약전 식 값 4.0 µL가 다릅니다. 규제 문서에는 약전 식 값을 인용합니다.

· 검출 파장은 변경할 수 없는 항목입니다.

· 비용 추정은 입력한 연간 건수와 단가에 따라 달라집니다.

8 계산 근거

· 이론단수 N = L / (h × dp) — 환산단높이 h: 전다공성 2.00, Core-Shell 1.37.

· 분리능 비 $Rs_2/Rs_1 = \sqrt{(N_2/N_1)}$ — 선택성(α)·보유계수(k)가 같다고 가정한 값입니다.

· 분석시간·용매·주입량: 컬럼 체적비 $V_2/V_1 = (\varepsilon_2 \cdot L_2 \cdot dc_2^2)/(\varepsilon_1 \cdot L_1 \cdot dc_1^2) = 0.338$ (총 공극률 전다공성 0.65, Core-Shell 0.55 가정). 「약전 식」 값은 대한민국약전 별표 5 79.4·USP 〈621〉·Ph. Eur. 2.2.46의 기하 체적 식(L × dc², 공극률 보정 없음)으로 계산한 값입니다.

· 유속 환산: $F_2 = F_1 \times (dc_2^2 \times dp_1)/(dc_1^2 \times dp_2) = 1.923$ mL/min, 적용 유속 1.000 mL/min.

· 배압: $P_2 = P_1 \times (L_2/L_1) \times (dp_1/dp_2)^2 \times (dc_1/dc_2)^2 \times (F_2/F_1)$.

계산: ChromaTalk Lab Calculators — Fully Porous → Core-Shell Method Transfer · community.columnpia.co.kr/tools/calculators