



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 등록특허공보(B1)**

(45) 공고일자 2019년05월29일  
 (11) 등록번호 10-1983599  
 (24) 등록일자 2019년05월23일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
 G06F 17/50 (2006.01)  
 (52) CPC특허분류  
 G06F 17/5009 (2013.01)  
 (21) 출원번호 10-2017-0084730  
 (22) 출원일자 2017년07월04일  
 심사청구일자 2017년07월04일  
 (65) 공개번호 10-2019-0004469  
 (43) 공개일자 2019년01월14일  
 (56) 선행기술조사문헌  
 US20120046776 A1\*  
 KR101675348 B1\*  
 JP2017062191 A  
 JP2015050062 A  
 \*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
 한국과학기술연구원  
 서울특별시 성북구 화랑로14길 5 (하월곡동)  
 서울대학교산학협력단  
 서울특별시 관악구 관악로 1 (신림동)  
 (뒷면에 계속)  
 (72) 발명자  
 이광렬  
 서울특별시 성북구 화랑로14길 5  
 한상수  
 서울특별시 성북구 화랑로14길 5  
 (뒷면에 계속)  
 (74) 대리인  
 박중환

전체 청구항 수 : 총 10 항

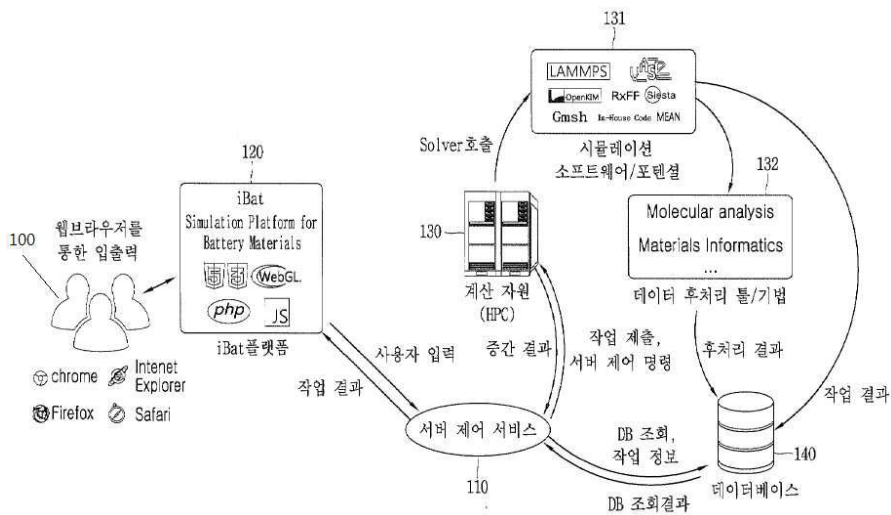
심사관 : 박승철

(54) 발명의 명칭 **가상 캐소드 시뮬레이션 방법 및 이를 지원하는 전자 장치**

**(57) 요약**

본 발명은 가상 캐소드 시뮬레이션 방법 및 이를 지원하는 전자 장치에 관한 것이다. 본 발명에 따른 전자 장치는 이차 전지에 적용되는 캐소드 물질을 컴퓨팅 장치를 기반으로 가상으로 설계하는데 관련된 적어도 하나의 데이터를 저장하는 메모리와, 메모리에 전기적으로 연결되는 프로세서를 포함한다. 프로세서는 사용자 입력에 따라 캐소드 물질 설계와 관련한 캐소드 물질을 선택할 수 있는 로비 페이지, 또는 캐소드 물질 설계와 관련한 적어도 하나의 입력을 처리하는 작업 페이지 중 적어도 하나를 출력하도록 설정된다.

**대표도** - 도1



(73) 특허권자

**서강대학교산학협력단**

서울특별시 마포구 백범로 35 (신수동, 서강대학교)

**포항공과대학교 산학협력단**

경상북도 포항시 남구 청암로 77 (지곡동)

(72) 발명자

**이민호**

서울특별시 성북구 화랑로14길 5

**조정재**

서울특별시 동대문구 이문로38길 17

**조맹효**

서울특별시 관악구 관악로 1 서울대학교

**임진명**

서울특별시 관악구 관악로 1 서울대학교

**김두호**

서울특별시 관악구 관악로 1 서울대학교

**황태순**

서울특별시 관악구 관악로 1 서울대학교

**김동철**

서울특별시 마포구 백범로 35 서강대학교

**이병주**

경상북도 포항시 남구 청암로 77 포항공과대학교

**이은구**

경상북도 포항시 남구 청암로 77 포항공과대학교

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 10041589

부처명 산업통상자원부

연구관리전문기관 한국산업기술평가관리원

연구사업명 산업융합기술산업원천기술개발사업

연구과제명 에너지용 나노소재의 효율적 설계를 위한 웹기반 멀티스케일 시뮬레이션 플랫폼 개발

기여율 1/1

주관기관 한국과학기술연구원

연구기간 2015.06.01 ~ 2016.05.31

## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

이차 전지에 적용되는 캐소드 물질을 컴퓨팅 장치를 기반으로 가상으로 설계하는데 관련된 적어도 하나의 데이터를 저장하는 메모리;

상기 메모리에 전기적으로 연결되며, 사용자 입력에 따라 캐소드 물질 설계와 관련한 캐소드 물질을 선택할 수 있는 로비 페이지, 또는 상기 캐소드 물질 설계 또는 설계된 캐소드 물질의 시뮬레이션을 수행하는 작업 페이지 중 적어도 하나를 출력하도록 설정되는 프로세서;를 포함하고,

상기 프로세서는 상기 로비 페이지에 캐소드의 원자 구조 또는 작업의 마지막 배열을 나타내는 시각화 윈도우를 출력하고, 상기 시각화 윈도우에서 각 원자의 종류별로 다른 색상으로 출력되도록 설정되고,

상기 프로세서는 상기 시각화 윈도우를 표시하는 시각화 윈도우 영역을 포함하고, 사용자가 현재 프로젝트에서 진행하는 캐소드 리스트를 나타내는 결과 테이블 영역, 및 현재 프로젝트에서 실행 중인 작업들의 리스트이며 결과 테이블로부터 작업을 선택할 수 있는 카드 분석 테이블 영역을 포함하는 상기 로비 페이지를 출력하도록 설정되고,

상기 프로세서는 상기 캐소드 물질의 결정 구조 생성을 수행하는 결정 빌더 영역, 상기 결정 빌더에서 생성된 결정 구조의 원자 구조를 나타내는 시각화 윈도우 영역, 원자 구조로부터의 화학량론 화학식 계산을 처리하는 대용량 계산 영역, 계산된 결과를 보이는 결과 영역, 상기 캐소드 물질의 시뮬레이팅을 수행하는 분석 영역, 및 캐소드 물질의 정보를 나열하는 정보 과학 영역을 포함하는 상기 작업 페이지를 출력하도록 설정된 전자 장치.

#### 청구항 2

제1항에 있어서,

상기 프로세서는

상기 결정 빌더 영역에서 상기 캐소드 물질의 결정 구조 생성을 수행할 때, 상기 작업 페이지의 중간에 사용자가 직전에 필드한 상기 캐소드 물질의 원자 구조를 보이는 시각화 윈도우를 배치하고, 상기 시각화 윈도우는 원자 구조 뷰어를 제공하는 전자 장치.

#### 청구항 3

제2항에 있어서,

상기 프로세서는

사용자 입력에 대응하여 상기 시각화 윈도우 영역에 표시된 상기 캐소드 물질의 원자 구조에 대한 적어도 하나의 스냅샷 이미지를 출력하도록 설정된 전자 장치.

#### 청구항 4

제3항에 있어서,

상기 프로세서는

복수의 스냅샷 이미지를 각각의 윈도우로 출력하도록 설정된 전자 장치.

#### 청구항 5

삭제

#### 청구항 6

삭제

**청구항 7**

제1항에 있어서,

상기 프로세서는

상기 캐소드 물질에 대한 완화(Relaxation), 확산(Diffusion), 전위(Potentials), 자유 에너지(Free Energy), 페이지(Phase), 상태 밀도(Density of states) 중 적어도 하나에 대응하는 표시 객체를 출력하도록 설정된 전자 장치.

**청구항 8**

제7항에 있어서,

상기 프로세서는

상기 페이지의 표시 객체를 선택하는 사용자 입력에 대응하여 시뮬레이션하는 물질의 명칭과 종류, 기하학적 구조, 충전율 및 시간을 입력할 수 있는 입력 상태 윈도우 영역 및 시뮬레이팅에 따른 결과를 출력하는 결과 윈도우 영역을 출력하도록 설정된 전자 장치.

**청구항 9**

제8항에 있어서,

상기 프로세서는

큐빅, 실린더, 스피어, 다공성 스피어, 다면체, 접시 구조 중 적어도 하나의 기하학적 구조를 제공하도록 설정된 전자 장치.

**청구항 10**

제8항에 있어서,

상기 프로세서는

상기 시뮬레이팅의 결과에 대해 리튬 프랙션, 페이지 분포, 2D 플롯 중 적어도 하나의 형태로 출력하도록 설정된 전자 장치.

**청구항 11**

제7항에 있어서,

상기 프로세서는

사용자 입력에 대응하여 통합된 상태 밀도, 선택된 궤도의 모든 원자들의 상태 밀도, 모든 원자들의 조합된 상태 밀도, 특정 원자들의 통합된 상태 밀도, 특정 원자들의 선택된 궤도에서의 상태 밀도, 특정 원자들의 조합된 상태 밀도 중 적어도 하나에 대응하는 그래프를 출력하도록 설정된 전자 장치.

**청구항 12**

캐소드 물질 설계와 관련하여 캐소드 물질을 선택할 수 있는 로비 페이지를 출력하는 과정;

사용자 입력을 수신하는 과정;

상기 사용자 입력에 대응하여 상기 캐소드 물질 설계 또는 설계된 캐소드 물질의 시뮬레이션을 수행하는 작업 페이지를 출력하는 과정;을 포함하고,

상기 로비 페이지를 출력하는 과정에서, 상기 로비 페이지에 캐소드의 원자 구조 또는 작업의 마지막 배열을 나타내는 시각화 윈도우를 출력하고, 상기 시각화 윈도우에서 각 원자의 종류별로 다른 색상으로 출력되도록 설정되고,

상기 로비 페이지를 출력하는 과정에서, 상기 시각화 윈도우를 표시하는 시각화 윈도우 영역을 포함하고, 사용자가 현재 프로젝트에서 진행하는 캐소드 리스트를 나타내는 결과 테이블 영역, 및 현재 프로젝트에서 실행 중

인 작업들의 리스트이며 결과 테이블로부터 작업을 선택할 수 있는 카트 분석 테이블 영역을 포함하는 상기 로비 페이지를 출력하도록 설정되고,

상기 작업 페이지를 출력하는 과정에서, 상기 캐소드 물질의 결정 구조 생성을 수행하는 결정 빌더 영역, 상기 결정 빌더에서 생성된 결정 구조의 원자 구조를 나타내는 시각화 윈도우 영역, 원자 구조로부터의 화학량론 화학식 계산을 처리하는 대용량 계산 영역, 계산된 결과를 보이는 결과 영역, 상기 캐소드 물질의 시뮬레이팅을 수행하는 분석 영역, 및 캐소드 물질의 정보를 나열하는 정보 과학 영역을 포함하는 상기 작업 페이지를 출력하도록 설정된 가상 캐소드 시뮬레이션 방법.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 이차 전지의 가상 캐소드 시뮬레이션 방법 및 전자 장치에 관한 것으로, 더욱 상세하게는 컴퓨팅 장치를 이용하여 이차 전지의 캐소드 물질의 선택과 변형 및 시뮬레이션 등을 수행할 수 있도록 지원하는 사용자 인터페이스를 제공하는 방법 및 전자 장치에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 종래 이차 전지는 휴대폰, 노트북, 스마트폰, 태블릿 PC 등의 전자용품 및 휴대용품에 광범위하게 사용되고 있다. 또한, 최근 전기 자동차가 부각되면서 대용량 및 고안정성의 이차 전지를 요구하고 있다.

[0003] 이러한 이차 전지는 크게 애노드(anode, 음극), 캐소드(cathode, 양극) 및 전해질을 포함한다. 애노드 소재로는 흑연과 같은 탄소계 소재가 사용되고 있다. 캐소드 소재로는 리튬 코발트 산화물과 같은 금속 산화물계 소재가 사용되고 있다. 그리고 전해질 소재로는 카보네이트와 같은 유기 소재가 사용되고 있다. 이와 같이 이차 전지에 사용되는 소재는 다양하다.

[0004] 이에 따라, 최적의 이차전지 소재를 개발하기 위해서는 다양한 소재물성변수(조성, 결정구조, 입자크기 등)에 대한 분석과 주변 상황에 따른 물성의 변화를 신속하게 파악하는 것이 중요하다.

[0005] 이러한 자료 수집을 위하여, 매우 많은 실험과 데이터 작성이 필요하기 때문에, 이차 전지에 관한 연구 개발에 매우 많은 비용과 인력이 요구되고 있다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0006] (특허문헌 0001) 한국등록특허 제10-0918387호(2009.09.15.)

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

[0007] 이러한 요구에 따라 컴퓨터 시뮬레이션은 이차 전지의 소재 개발 시 매우 유용하게 활용될 수 있을 것으로 예상된다. 하지만 실험연구자가 컴퓨터 시뮬레이션을 활용하기에는 초기 진입 장벽이 높기 때문에, 이러한 컴퓨터 시뮬레이션이 소재 개발 연구에 활발하게 활용되고 있지 못한 실정이다.

[0008] 이러한 관점에서 초보 실험연구자도 손쉽게 컴퓨터 시뮬레이션을 이용할 수 있게 해 주는 플랫폼 개발은 소재 개발에 유용하게 활용될 수 있으며, 향후 소재 개발의 새로운 패러다임을 제공할 것으로 예상된다.

[0009] 따라서 본 발명은 이차 전지에 사용되는 캐소드 관련 물질들의 선택과 물성의 변형 등을 자유롭고 간단하게 구성할 수 있도록 하고, 캐소드 물질과 관련한 가상 시뮬레이션을 신속하고 용이하게 할 수 있도록 하는 가상 캐소드 시뮬레이션 방법 및 이를 지원하는 전자 장치를 제공함에 있다.

**과제의 해결 수단**

[0010] 상술한 목적을 달성하기 위하여, 본 발명의 가상 캐소드 시뮬레이션 방법은 캐소드 물질 설계와 관련하여 캐소

드 물질을 선택할 수 있는 로비 페이지를 출력하는 과정, 사용자 입력을 수신하는 과정, 상기 사용자 입력에 대응하여 상기 캐소드 물질 설계 또는 설계된 캐소드 물질의 시뮬레이션을 수행하는 작업 페이지를 출력하는 과정을 포함할 수 있다.

- [0011] 본 발명의 가상 캐소드 시뮬레이션을 지원하는 전자 장치는 이차 전지에 적용되는 캐소드 물질을 컴퓨팅 장치로 기반으로 가상으로 설계하는데 관련된 적어도 하나의 데이터를 저장하는 메모리, 상기 메모리에 전기적으로 연결되는 프로세서를 포함하고, 상기 프로세서는 사용자 입력에 따라 캐소드 물질 설계와 관련한 캐소드 물질을 선택할 수 있는 로비 페이지, 또는 상기 캐소드 물질 설계 또는 설계된 캐소드 물질의 시뮬레이션을 수행하는 작업 페이지 중 적어도 하나를 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0012] 상기 프로세서는 상기 캐소드의 원자 구조 또는 작업의 마지막 배열을 나타내는 시각화 윈도우 영역, 사용자가 현재 프로젝트에서 진행하는 캐소드 리스트를 나타내는 결과 테이블 영역, 현재 프로젝트에서 실행 중인 작업들의 리스트이며 결과 테이블로부터 작업을 선택할 수 있는 카트 분석 테이블 영역 중 적어도 하나를 포함하는 상기 로비 페이지를 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0013] 상기 프로세서는 사용자 입력에 대응하여 상기 시각화 윈도우 영역에 표시된 상기 캐소드 물질의 원자 구조에 대한 적어도 하나의 스냅샷 이미지를 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0014] 상기 프로세서는 복수의 스냅샷 이미지를 각각의 윈도우로 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0015] 상기 프로세서는 상기 캐소드 물질의 결정 구조 생성을 수행하는 결정 빌더 영역, 상기 결정 빌더에서 생성된 결정 구조의 원자 구조를 나타내는 시각화 윈도우 영역, 원자 구조로부터의 화학량론 화학식 계산을 처리하는 대용량 계산 영역, 계산된 결과를 보이는 결과 영역, 상기 캐소드 물질의 시뮬레이팅을 수행하는 분석 영역, 캐소드 물질의 정보를 나열하는 정보 과학 영역 중 적어도 하나를 포함하는 상기 작업 페이지를 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0016] 상기 프로세서는 상기 시각화 윈도우에서 원자들의 색상을 종류 또는 선택 여부에 따라 다르게 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0017] 상기 프로세서는 상기 캐소드 물질에 대한 완화(Relaxation), 확산(Diffusion), 전위(Potentials), 자유 에너지(Free Energy), 페이지(Phase), 상태 밀도(Density of states) 중 적어도 하나에 대응하는 표시 객체를 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0018] 상기 프로세서는 상기 페이지 표시 객체를 선택하는 사용자 입력에 대응하여 시뮬레이션하는 물질의 명칭과 종류, 기하학적 구조, 충전율 및 시간을 입력할 수 있는 입력 상태 윈도우 영역 및 시뮬레이팅에 따른 결과를 출력하는 결과 윈도우 영역을 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0019] 상기 프로세서는 큐빅, 실린더, 스피어, 다공성 스피어, 다면체, 접시 구조 중 적어도 하나의 기하학적 구조를 제공하도록 설정될 수 있다.
- [0020] 상기 프로세서는 상기 시뮬레이팅 결과에 대해 리튬 프랙션, 페이지 분포, 2D 플롯 중 적어도 하나의 형태로 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0021] 상기 프로세서는 사용자 입력에 대응하여 통합된 상태 밀도, 선택된 궤도의 모든 원자들의 상태 밀도, 모든 원자들의 조합된 상태 밀도, 특정 원자들의 통합된 상태 밀도, 특정 원자들의 선택된 궤도에서의 상태 밀도, 특정 원자들의 조합된 상태 밀도 중 적어도 하나에 대응하는 그래프를 출력하도록 설정될 수 있다.

**발명의 효과**

- [0022] 이상에서 살펴본 바와 같이 본 발명에서 제시하는 가상 캐소드 시뮬레이션 방법 및 이를 지원하는 전자 장치는 이차 전지의 캐소드 관련 물질의 선택과 변형 및 분석 등을 신속하고 용이하게 수행할 수 있도록 지원한다.
- [0023] 이에 따라, 본 발명은 이차 전지 개발에 소용되는 많은 비용과 인력 투자를 최적화하고, 개발 시간을 앞당길 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

- [0024] 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼을 개략적으로 나타낸 도면,  
 도 2는 본 발명의 실시예에 따른 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼이 제공하는 페이지의 상태바를 나타낸 도면,

- 도 3은 본 발명의 실시예에 따른 로비 페이지의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 4는 본 발명의 실시예에 따른 시각화 윈도우의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 5는 본 발명의 실시예에 따른 스냅샷 출력의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 6은 본 발명의 실시예에 따른 결과 테이블의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 7은 본 발명의 실시예에 따른 필터 항목의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 8은 본 발명의 실시예에 따른 카트 분석과 관련한 항목 선택의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 9는 본 발명의 실시예에 따른 카트 분석과 관련한 항목 이동의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 10은 본 발명의 실시예에 따른 작업 페이지의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 11은 본 발명의 실시예에 따른 캐소드 빌더의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 12는 본 발명의 실시예에 따른 캐소드 빌더의 다른 한 예를 나타낸 도면,
- 도 13은 본 발명의 실시예에 따른 대용량 계산 윈도우 운용과 관련한 도면,
- 도 14는 본 발명의 실시예에 따른 대용량 계산 윈도우의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 15는 본 발명의 실시예에 따른 대용량 계산 결과의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 16은 본 발명의 실시예에 따른 결정 구조 도핑과 관련한 화면의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 17은 본 발명의 실시예에 따른 도핑 원자에 대한 계산 값 표시의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 18은 본 발명의 실시예에 따른 도핑 원자의 대용량 계산 값을 표시하는 결과 윈도우의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 19는 본 발명의 실시예에 따른 캐소드 물질 분석과 관련한 분석 윈도우의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 20은 본 발명의 실시예에 따른 완화 과정 진행 확인의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 21은 본 발명의 실시예에 따른 완화 상태 변경에 따른 결과 윈도우를 나타낸 도면,
- 도 22는 본 발명의 실시예에 따른 확산 상태 운용과 관련한 도면,
- 도 23는 본 발명의 실시예에 따른 원자의 이동과 관련한 원자 선택을 설명하는 도면,
- 도 24는 본 발명의 실시예에 따른 원자의 이동과 관련한 목적지 선택을 설명하는 도면,
- 도 25는 원자 이동에 따른 확산 이동 경로를 설명하는 도면,
- 도 26은 본 발명의 실시예에 따른 탈리 반응의 전위를 설명하는 도면,
- 도 27은 본 발명의 실시예에 따른 자유 에너지를 설명하는 도면,
- 도 28은 본 발명의 실시예에 따른 페이지 필드를 설명하는 도면,
- 도 29는 본 발명의 실시예에 따른 페이지 필드의 입력 상태 윈도우를 보다 상세히 나타낸 도면,
- 도 29는 본 발명의 실시예에 따른 페이지 필드의 입력 상태 윈도우를 보다 상세히 나타낸 도면,
- 도 30은 본 발명의 실시예에 따른 방전 및 충전에 따른 상태 표시를 나타낸 도면,
- 도 31은 본 발명의 실시예에 따른 작업 모델링의 기하학적 구조의 다양한 예를 나타낸 도면,
- 도 32는 본 발명의 실시예에 따른 결과 윈도우 중 Li Fraction과 관련한 도면,
- 도 33은 본 발명의 실시예에 따른 결과 윈도우 중 Phase Distribution과 관련한 도면,
- 도 34는 본 발명의 실시예에 따른 결과 윈도우 중 2D Plot과 관련한 도면,
- 도 35는 본 발명의 실시예에 따른 상태 밀도와 관련한 도면,
- 도 36은 본 발명의 실시예에 따른 상태 밀도 관련 정보 입력 영역을 나타낸 도면,
- 도 37은 본 발명의 실시예에 따른 통합된 상태 밀도를 나타낸 도면,

- 도 38은 본 발명의 실시예에 따른 선택된 궤도의 모든 원자들의 상태 밀도를 나타낸 도면,
- 도 39는 본 발명의 실시예에 따른 모든 원자들의 조합된 상태 밀도를 나타낸 도면,
- 도 40은 본 발명의 실시예에 따른 특정 원자들의 통합된 상태 밀도를 나타낸 도면,
- 도 41은 본 발명의 실시예에 따른 특정 원자들의 선택된 궤도에서의 상태 밀도를 나타낸 도면,
- 도 42는 본 발명의 실시예에 따른 특정 원자들의 조합된 상태 밀도를 나타낸 도면,
- 도 43은 본 발명의 실시예에 따른 가상 캐소드 시뮬레이션 방법을 설명하는 도면이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

- [0025] 이하, 첨부 도면을 참조하여 본 발명의 실시예를 보다 상세하게 설명하고자 한다. 하기의 설명에서는 본 발명의 실시예를 이해하는데 필요한 부분만이 설명되며, 그 이외 부분의 설명은 본 발명의 요지를 흐트리지 않도록 생략될 것이라는 것을 유의하여야 한다.
- [0026] 이하에서 설명되는 본 명세서 및 청구범위에 사용된 용어나 단어는 통상적이거나 사전적인 의미로 한정해서 해석되어서는 아니 되며, 발명자는 그 자신의 발명을 가장 최선의 방법으로 설명하기 위해 용어의 개념으로 적절하게 정의할 수 있다는 원칙에 입각하여 본 발명의 기술적 사상에 부합하는 의미와 개념으로 해석되어야만 한다. 따라서 본 명세서에 기재된 실시예와 도면에 도시된 구성은 본 발명의 바람직한 실시예에 불과할 뿐이고, 본 발명의 기술적 사상을 모두 대변하는 것은 아니므로, 본 출원시점에 있어서 이들을 대체할 수 있는 다양한 균등물과 변형 예들이 있을 수 있음을 이해하여야 한다.
- [0027] 이하, 상기한 목적을 달성하기 위한 본 발명의 바람직한 실시예를 첨부된 도면을 참조하여 상세히 설명하면 다음과 같다.
- [0028] 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼을 개략적으로 나타낸 도면이다.
- [0029] 도 1을 참조하면, 이차전지 시뮬레이션 시스템은 사용자 장치(100), 메인 서버, 복수의 시뮬레이션 서버들, 데이터베이스(140)를 포함할 수 있다.
- [0030] 메인 서버는 사용자 장치(100)(예: 사용자 컴퓨팅 장치)에게 서버 제어 서비스(110)를 제공하며, 데이터베이스(140)에 데이터를 저장하거나, 데이터베이스(140)에 저장된 데이터를 사용자 장치(100)에게 제공한다.
- [0031] 복수의 시뮬레이션 서버들은 계산 자원(HPC)(130)으로 표현될 수 있으며, 서로 다른 시뮬레이션 소프트웨어/포텐셜(131)을 이용하여 이차전지와 관련된 시뮬레이션을 수행한다. 구체적으로, 사용자 장치(100)는 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼(120, 예: iBat 플랫폼)을 기반으로 메인 서버에 접속하여 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼이 제공하는 사용자 인터페이스를 통해, 캐소드 물질 설계와 관련한 작업을 수행한다. 메인 서버는 설정 정보를 계산 자원(130)으로 전송한다. 여기서, 메인 서버는 복수의 시뮬레이션 서버들 중에서 설정 정보를 전송할 적어도 하나의 서버를 선택할 수 있다.
- [0032] 설정 정보를 수신한 시뮬레이션 서버는 시뮬레이션 소프트웨어 및 포텐셜(131)을 호출하여 시뮬레이션을 수행하거나, 데이터 후처리 툴/기법(132)을 통해 시뮬레이션을 수행하고, 시뮬레이션 결과를 데이터베이스(140)에 저장한다. 이때, 메인 서버는 데이터베이스(140)와 연동하여, 시뮬레이션 중간결과 및 최종결과를 사용자 장치(100)에게 전송한다. 이를 통해, 사용자 장치(100)는 메인 서버 접속을 통해, 시뮬레이션 중간결과 및 최종결과를 확인할 수 있다.
- [0033] 여기서, 시뮬레이션 소프트웨어 및 포텐셜(131)은 제일원리계산, 분자동역학, Reactive force field, MEAM, Phase field, 유한요소법의 상용 소프트웨어 및 In-House 소프트웨어를 포함할 수 있다.
- [0034] 상술한 이차 전지 시뮬레이션 시스템은 적어도 하나의 서버들(예: 메인 서버, 시뮬레이션 서버들 및 데이터베이스(140))에 접속되는 사용자 장치(100)를 기반으로 가상 캐소드 시뮬레이션 기능을 수행하는 예를 설명하였으나, 본 발명이 이에 한정되는 것은 아니다. 예컨대, 이차 전지 시뮬레이션 시스템에서 메인 서버, 시뮬레이션 서버 및 데이터베이스(140)는 사용자 장치(100)에서의 프로세서와, 메모리 및 시뮬레이션 모듈(하드웨어 또는 소프트웨어 모듈)로 대체될 수 있다. 사용자 장치(100)는 디스플레이와, 입력부(예: 키보드, 마우스 등)를 더 포함하며, 사용자 입력에 대응하여 가상 캐소드 설계와 관련한 다양한 사용자 인터페이스를 제공할 수 있다.



- [0035] 또는, 이차 전지 시뮬레이션 시스템은 메인 서버, 시뮬레이션 서버 및 데이터베이스(140)를 포함하는 하나의 서버 장치로 구성될 수 있다. 이 경우 서버 장치는 사용자 장치(100) 접속 및 사용자 입력에 대응하여, 가상 캐소드 시뮬레이션과 관련한 적어도 하나의 사용자 인터페이스를 사용자 장치(100)에 제공할 수 있다. 하나의 서버 장치는 서버 프로세서, 서버 메모리, 사용자 장치(100)와 통신할 수 있는 통신 인터페이스 등을 포함하고, 가상 캐소드 시뮬레이션과 관련한 데이터의 전송 또는 사용자 입력 수신 등을 처리할 수 있다. 이하, 복수개의 서버들로 구성된 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼 또는 가상 캐소드 시뮬레이션 기능을 제공하는 사용자 장치(100) 또는 하나의 서버가 사용자 장치(100)의 디스플레이에 통해 제공하는 가상 캐소드 시뮬레이션과 관련한 사용자 인터페이스에 대하여 설명하기로 한다.
- [0036] 사용자 장치(100)의 디스플레이는 가상 캐소드 물질 설계와 관련하여, 로비 페이지와 작업 페이지를 출력할 수 있다. 예컨대, 사용자 장치(100)가 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼을 기반으로 메인 서버(예: 서버 제어 서비스)에 접속하면, 사용자 장치(100)는 메인 서버로부터 로비 페이지를 수신하여 출력할 수 있다. 사용자 장치(100)는 로비 페이지에서 지정된 입력이 발생하면, 해당 입력을 메인 서버에 전송하여, 작업 페이지를 수신하여 출력할 수 있다. 로비 페이지 및 작업 페이지는 프로세서에 의해 디스플레이에 출력될 수 있다. 이 동작에서 사용자 장치(100)는 로비 페이지 또는 작업 페이지와 관련한 데이터를 메모리에 저장할 수 있다. 또는 적어도 하나의 서버가 가상 캐소드 시뮬레이션 운용과 관련한 데이터를 사용자 장치(100)에 제공하면, 사용자 장치(100)는 이를 수신하고 디스플레이에 출력할 수 있다. 이에 따라, 본 발명의 가상 캐소드 물질 설계를 지원하는 전자 장치는 상술한 적어도 하나의 서버 및 사용자 장치(100) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0037] 도 2는 본 발명의 실시예에 따른 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼이 제공하는 페이지의 상태바를 나타낸 도면이다.
- [0038] 도 2를 참조하면, 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼이 제공하는 캐소드 물질 설계와 관련한 페이지는 로비 페이지 및 작업 페이지를 포함할 수 있다. 로비 페이지 및 작업 페이지는 공통적으로 상단에 상태바를 가질 수 있다.
- [0039] 상태바는 로비 페이지 전환을 위한 로비 객체(401) 및 작업 페이지 전환을 위한 작업 객체(202)를 포함할 수 있다. 상태바는 현재 사용자 ID(예: 이메일 주소) 및 로그인 시간에서의 현재 작업명을 나타낼 수 있다. 상태바의 우측 코너에는 도움말 버튼(203)이 매뉴얼 보기를 위해 제공되고, 진행 중인 작업의 현재 상태를 나타내는 작업 상태 버튼(204)이 배치될 수 있다.
- [0040] 사용자가 처음 캐소드 물질 설계와 관련한 웹 페이지에 접속하면, 앞서 도 2에서 설명한 로비 페이지가 제공될 수 있다. 로비 페이지는 디폴트로 세팅된 페이지일 수 있다. 사용자는 도 2에서 설명한 상태바의 작업 객체(202)를 클릭하여 언제든지 작업 페이지로 이동할 수 있다. 사용자는 작업 페이지에서 상태바의 로비 객체(201)를 클릭하여 언제든지 로비 페이지로 이동할 수 있다.
- [0041] 도 3은 본 발명의 실시예에 따른 로비 페이지의 한 예를 나타낸 도면이다.
- [0042] 도 3을 참조하면, 사용자가 처음 캐소드 물질 설계와 관련한 전자 장치에 접속하면, 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼은 로비 페이지를 제공할 수 있다. 로비 페이지는 디폴트로 세팅된 페이지일 수 있다. 사용자는 도 2에서 설명한 상태바의 작업 객체를 클릭하여 언제든지 작업 페이지로 이동할 수 있다. 사용자는 도 2에서 설명한 상태바의 로비 객체를 클릭하여 언제든지 로비 페이지로 이동할 수 있다.
- [0043] 로비 페이지는 3가지 섹션을 포함할 수 있다. 캐소드의 원자 구조 또는 작업의 마지막 배열을 나타내는 시각화 윈도우 영역(301), 사용자가 현재 프로젝트에서 진행하는 캐소드 리스트를 나타내는 결과 테이블 영역(302), 현재 프로젝트에서 실행 중인 작업들의 리스트이며, 결과 테이블로부터 작업을 선택할 수 있는 카트 분석 테이블 영역(303)을 포함할 수 있다.
- [0044] 도 4는 본 발명의 실시예에 따른 시각화 윈도우의 한 예를 나타낸 도면이다.
- [0045] 앞서 설명한 바와 같이, 도 3에서 설명한 로비 페이지의 왼쪽에는 원자 구조 또는 작업의 마지막 배열을 나타내는 시각화 윈도우가 표시될 수 있다. 캐소드 구조(또는 작업의 마지막 배열)는 결과 테이블(또는 작업 테이블)에서의 선택에 따라 표시될 수 있다. 도 4에 도시된 시각화 윈도우에서의 원자 색상은 CPK 컬러링 형식에 따른다. 추가적으로 약간의 수정은 보다 나은 구분을 위해 적용될 수 있다. 원자의 색은 칼러 리스트를 위한 페이지에서 제공될 수 있다.
- [0046] 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼은 입력 장치 조작(예: 마우스 동작)에 따라 시각화 윈도우의 다양한 표시 변경을 처리할 수 있다. 예컨대, 마우스 동작의 수는 시각화를 변화하기 위해 사용될 수 있다. 마우스의 센터 휠의

스크롤링은 줌인 또는 줌아웃에 이용될 수 있다. 마우스의 왼쪽 버튼을 이용한 드래그는 뷰 각도 변화에 이용될 수 있다. 마우스의 우측 버튼을 이용한 드래그는 이미지 이동에 이용될 수 있다.

- [0047] 좌측 하단 코너에 배치된 3개의 x, y, z 버튼은 +x, +y, +z축들 각각의 이미지를 배열하는데 이용될 수 있다. I 버튼은 도시된 도면의 최우측에 나타낸 바와 같이 요약 정보를 표시한다.
- [0048] 도 5는 본 발명의 실시예에 따른 스냅샷 출력의 한 예를 나타낸 도면이다.
- [0049] 앞서 도 4에 설명한 시각화 윈도우의 우측 상단에 배치된 카메라 버튼을 기반으로 시각화 윈도우에 대한 스냅샷이 제공될 수 있다. 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼은 카메라 버튼이 클릭되면, 스냅샷을 가지는 새 윈도우를 출력할 수 있다. 도시된 바와 같이 모든 스냅샷은 독립된 윈도우들에서 제공되고, 이에 따라 사용자는 이미지들을 비교할 수 있다. 스냅샷 이미지는 나중에 사용자가 이용할 수 있도록 파일로서 저장될 수 있다. 이미지 저장을 위하여, 스냅샷 이미지 상에서의 커서를 위치시키고 우측 클릭을 수행하면, 크롬 브라우저의 메뉴가 실행될 수 있다.
- [0050] 도 6은 본 발명의 실시예에 따른 결과 테이블의 한 예를 나타낸 도면이며, 도 7은 본 발명의 실시예에 따른 필터 항목의 한 예를 나타낸 도면이다.
- [0051] 도 6을 참조하면, 결과 테이블에서, 사용자는 저장된 작업들로부터 캐소드 데이터를 검색할 수 있다. 선택 후 "Search"버튼(601) 클릭에 따라 효과적으로 캐소드 검색을 할 수 있도록 돕는 필터가 제공된다.
- [0052] (-) 버튼(602)은 캐소드 작업을 삭제하는 기능을 제공한다. 완화된 작업 또는 완화되지 않은 작업 여부에 따라 필터링한 작업들을 보여주는 U 버튼(603), R 버튼(604)이 표시될 수 있다. 저장 전에 작업 이름으로 작업을 필터링하는 기능을 제공할 수 있다. 예컨대, 도시된 도면에서는 작업 이름이 "LNCO"로 필터링된 상태를 나타낸다. "Formula" 항목(605)은 캐소드 물질의 공식 입력에 따라 작업들을 필터링하는데 이용될 수 있다. "Advanced"버튼(606)은 조건들을 제한하기 위한 작업들을 필터링하는데 이용될 수 있다. "Advanced"버튼(606)이 선택되면, 도 7에 도시된 바와 같이 개선된 필터 화면이 제공될 수 있다. 개선된 필터 화면은 예컨대, 볼륨, 밀도, 에너지, 밴드 갭, OCV 등 다양한 항목들을 기입할 수 있는 입력 영역을 포함할 수 있다.
- [0053] 도 8은 본 발명의 실시예에 따른 카트 분석과 관련한 항목 선택의 한 예를 나타낸 도면이며, 도 9는 본 발명의 실시예에 따른 카트 분석과 관련한 항목 이동의 한 예를 나타낸 도면이다.
- [0054] 도 8을 참조하면, 카트 분석(Cart for Analysis)과 관련하여, 사용자는 작업 페이지를 위한 저장된 작업들을 보낼 수 있다. 예컨대, 결과 테이블(801)에서 카트 분석(802)으로 작업들을 보내기 위해, 결과 테이블(801)의 캐소드 작업들을 도시된 바와 같이 선택(Click)할 수 있다. 결과 테이블(801)에서 선택된 작업들은 도 9에 도시된 바와 같이 카트 분석(802)로 이동된다.
- [0055] 도 10은 본 발명의 실시예에 따른 작업 페이지의 한 예를 나타낸 도면이다.
- [0056] 도 10을 참조하면, 캐소드 섹션에서 작업 페이지는 6의 서브 파트로 구성된다. 작업 페이지에서, 사용자는 선택에 따른 캐소드 물질의 설계 및 시뮬레이션을 수행한다. 작업 페이지는 캐소드 물질의 결정(크리스탈) 구조 생성을 수행하는 결정 빌더(Cystal builder) 영역(1001), 결정 빌더(또는 캐소드 빌더 윈도우)에서 생성된 결정 구조의 원자 구조를 나타내는 시각화 윈도우 영역(1002), 원자 구조로부터의 화학량론 화학식 계산을 처리하는 대용량 계산(High Throughput Calculation) 영역(1003), 계산된 결과를 보이는 결과(Results) 영역(1004), 다양한 방법을 통한 캐소드 물질의 시뮬레이팅을 수행하는 분석(Analysis) 영역(1005), 캐소드 물질의 정보 나열을 하는 정보 과학(informatics) 영역(1006)을 포함할 수 있다.
- [0057] 도 11은 본 발명의 실시예에 따른 캐소드 빌더의 한 예를 나타낸 도면이며, 도 12는 본 발명의 실시예에 따른 캐소드 빌더의 다른 한 예를 나타낸 도면이다.
- [0058] 캐소드 샘플 만드는 법(How to Make Anode Sample)과 관련하여, 작업 페이지의 캐소드 섹션에서, 사용자는 결정 구조를 생성하고, 캐소드 물질 분석을 위한 결정 구조를 시뮬레이션할 수 있다. 캐소드 물질을 생성하기 위하여, 사용자는 로비 페이지의 상태바에서 작업 객체(202)를 선택할 수 있다. 작업 페이지에서, 캐소드의 결정 구조 생성과 관련한 입력이 발생하면, 도 11에 도시된 바와 같이 캐소드 빌더가 출력될 수 있다. 캐소드 빌더 윈도우에서, 사용자는 시뮬레이션 하기 위한 캐소드 물질의 지정된 결정 정보를 입력할 수 있다.
- [0059] LiCoO<sub>2</sub>는 전형적인 캐소드 물질 중 하나이다. LiCoO<sub>2</sub>는 R-3m, O3 타입 구조이고, 캐소드 물질로서 사용된다. 사용자는 도 12의 도시된 바와 같이 캐소드 물질을 빌드하기 위한 CIF 정보를 로드한다. LiCoO<sub>2</sub>의 원자 정보는 결

정 빌더 윈도우에서 입력하고, "Generate" 버튼(1201)을 클릭할 수 있다. 이후, 작업 페이지는  $\text{LiCoO}_2$ 의 원자 정보 및 셀 정보를 표시한다.

- [0060] 작업 페이지의 중간에, 사용자가 직전에 빌드한 원자 구조를 보이는 시각화 윈도우가 배치된다. 시각화 윈도우는 원자 구조 뷰어를 제공한다. 시각화 윈도우에서의 원자 색상은 CPK 컬러링 형식에 따른다. 그러나, 약간의 수정은 보다 나은 구분을 위해 적용될 수 있다. 원자의 색은 컬러 리스트를 위한 페이지에서 제공될 수 있다.
- [0061] 도 13은 본 발명의 실시예에 따른 대용량 계산 윈도우 운용과 관련한 도면이며, 도 14는 본 발명의 실시예에 따른 대용량 계산 윈도우의 한 예를 나타낸 도면이다. 도 15는 본 발명의 실시예에 따른 대용량 계산 결과의 한 예를 나타낸 도면이다.
- [0062] 도 13에 도시된 바와 같이, 작업 페이지에서, 대용량 계산 영역(1303)이 제공된다. 결정 빌더 윈도우(1301)에서의 입력은 결정 구조가 사용되며, "Enumerate" 버튼(1309)이 선택되면, 도 14에 도시된 바와 같이 가능한 화학량론 구성이 표시된다. 사용자는 작업 이름 박스를 입력하여 구조를 저장할 수 있다. "Calculate" 버튼(1310)이 선택되면, 화학량론 계산이 수행될 수 있다. "Calculate" 버튼 선택 이후, 결과 윈도우에는 도 15에 도시된 바와 같이 결과가 출력된다.
- [0063] 도 16은 본 발명의 실시예에 따른 결정 구조 도핑과 관련한 화면의 한 예를 나타낸 도면이며, 도 17은 본 발명의 실시예에 따른 도핑 원자에 대한 계산 값 표시의 한 예를 나타낸 도면이다. 도 18은 본 발명의 실시예에 따른 도핑 원자의 대용량 계산 값을 표시하는 결과 윈도우의 한 예를 나타낸 도면이다.
- [0064] 결정 구조의 도핑(Doping from the crystal structure)과 관련하여, 다른 원자들에 초기 원자를 도핑하기 위하여, 사용자는 빌드 결정 구조 섹션 앞에 결정 구조를 먼저 생성한다.  $\text{LiCoO}_2$  결정 구조에서, 각 원자들은 시각화 윈도우(1610)에 표시된다. 원자 선택(Selected atom)을 클릭(click)하여, 다른 원자(Target element)에 도핑하고자 하는 원자가 선택되면, 선택된 원자는 자동적으로 선택된 원자들 옆에 표시된다. 사용자는 추가 원자를 선택할 수 있다.
- [0065] 이후, 도 17에서와 같이 타겟 요소 박스(Target element box)내에서 도핑된 원자가 입력되고, "Enumerate" 버튼(1710)이 클릭되면, 가능한 화학량론적인 구성이 표시된다. 사용자는 작업 이름 박스를 입력하여 구조를 저장하고, "Calculate" 버튼(1720)을 클릭하여 계산을 수행할 수 있다.
- [0066] "Calculate" 버튼(1720) 선택 이후, 초기 화학량론 구성의 결과 및 도핑된 화학량론 구성은 도 18에 도시된 바와 같이 결과 윈도우에 표시될 수 있다.
- [0067] 도 19는 본 발명의 실시예에 따른 캐소드 물질 분석과 관련한 분석 윈도우의 한 예를 나타낸 도면이며, 도 20은 본 발명의 실시예에 따른 완화 과정 진행 확인의 한 예를 나타낸 도면이다.
- [0068] 캐소드 물질 분석(How to Analyze Cathode Material)과 관련하여, 사용자는 캐소드 물질 설계 과정을 완성하고, 시뮬레이팅을 수행할 수 있다. 캐소드 물질 분석과 관련한 작업 페이지는 도시된 바와 같은 분석 윈도우가 표시될 수 있다. 분석 윈도우는 도 19에 도시된 바와 같이 완화(Relaxation)(1910), 확산(Diffusion)(1920), 전위(Potentials)(1930), 자유 에너지(Free Energy)(1940), 페이즈(Phase)(1950), 기 생성된 결정 구조에서의 상태 밀도(Density of states)(1960) 등의 표시 객체(또는 메뉴, 아이콘 등)를 포함할 수 있다.
- [0069] 결정 구조의 완화를 위하여, 캐소드 물질 설계 전에 구조를 계산한다. 분석 윈도우 상에, 완화(Relaxation)(1910)가 선택되면, 선택된 캐소드 물질에 대한 완화 과정과 관련한 화면 인터페이스가 출력될 수 있다. 예컨대, 도 20에 도시된 바와 같이 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼은 완화 과정 수행과 관련한 샘플이 검색되면, 해당 샘플에 대한 팝업창을 작업 페이지에 출력할 수 있다. "확인"이 선택되면, 완화 과정이 진행될 수 있다.
- [0070] 도 21은 본 발명의 실시예에 따른 완화 상태 변경에 따른 결과 윈도우를 나타낸 도면이다. 도 21에 도시된 바와 같이, 완화 이후, 결과 윈도우는 비완화된 상태에서 완화된 상태로 변경된다.
- [0071] 도 22는 본 발명의 실시예에 따른 확산 상태 운용과 관련한 도면이다.
- [0072] 결정 구조의 확산을 위하여, 사용자는 캐소드 물질 설계 섹션 전에 구조를 계산한다. 분석 윈도우 상에, "확산" 버튼(1920)이 선택되면, 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼은 확산 진행과 관련한 도 22에 도시된 바와 같은 정보 입력과 관련된 입력 영역을 제공할 수 있다. 해당 입력 영역들에서 정보가 입력되면, 물질 이름과 확산 경로 및 계산 상태를 포함하는 완화된 캐소드 정보가 표시될 수 있다.

[0073] 운동학적 측면에서, 리튬 이온의 이송 배리어는 Li 이온 배터리 시스템에서 C-rate와 관련된 밀도를 통제하기 위해 고려될 수 있는 요소이다. 배리어는 새들 포인트(saddle points)를 찾고 반응물과 생성물 사이의 에너지 경로를 최소화하는 방법에서 설명되는 NEB(Nudged Elastic Band)에 의해 계산된다. 계산을 위하여, 반응 경로를 따른 예측된 중간 이미지들의 숫자는 작업 페이지에서 입력될 수 있다.

[0074] 도 23는 본 발명의 실시예에 따른 원자의 이동과 관련한 원자 선택을 설명하는 도면이며, 도 24는 본 발명의 실시예에 따른 원자의 이동과 관련한 목적지 선택을 설명하는 도면이다. 도 25는 원자 이동에 따른 확산 이동 경로를 설명하는 도면이다.

[0075] 도 23에서, 제1 "select"버튼(2310) 클릭에 의해 이동을 희망하는 원자를 선택할 수 있다. 도 24에서 제2 "select"버튼(2410) 클릭에 의해 원자의 목적지를 선택하고, 원자의 목적지를 클릭할 수 있다. 이후, NEB에 의한 확산 계산을 위해 "simulate"버튼(2420)이 클릭되고, 계산이 종료되면, 도 25에서와 같이 에너지 배리어 및 확산 경로가 윈도우에 표시된다.

[0076] 도 26은 본 발명의 실시예에 따른 탈리 반응의 전위를 설명하는 도면이다.

[0077] 전위 계산을 위하여, 완화 섹션 전에 구조에 완화를 수행될 수 있다. 최적화된 구조를 찾기 위하여, 완화는 수행되어야 한다. 완화로부터, 사용자는 특정 원자 조직, 배열, 격자 파라미터들과 같은 다양한 파라미터를 획득할 수 있다. 격자 파라미터들과 관련하여, 혼합 엔탈피(Mixing enthalpy)가 계산될 수 있다. 열역학적 측면에서, Li 빈격자점 배열에 의해 계산된 혼합 엔탈피는 다음 수학적 1에서처럼 상대적으로 다른 배열의 구조적 안정성을 지시한다.

[0078] [수학적 1]

$$\Delta H_{mixing} = E_{Li_{1-x}TMO_2} - xE_{LiTMO_2} - (1-x)E_{TMO_2}$$

[0079]

[0080] 여기서,  $E_{Li_{1-x}TMO_2}$  는 x 몰 프랙션에서 특정 Li 빈격자점 배열의 전체 에너지이고,  $E_{LiTMO_2}$  는 리튬 산화 구조 전체의 총 에너지이며,  $E_{TMO_2}$  는 탈리된 구조 전체의 총 에너지이다. 배열 혼합 엔탈피는 페이지(phase)들(예: 두개 또는 하나의 페이지), 전기화학적 전압 거동, 순환성 등을 분석하기 위해 이용될 수 있다.

[0081] 전압 거동과 관련하여, 개방전압(Open circuit voltage)에서 의미하는 캐소드(예: 부극) 및 캐소드(예: 정극) 사이의 평형 전압은, 다음 수학적 2에서와 같이 캐소드와 캐소드 사이의 Li 화학적 전위 차에 의해 계산될 수 있다.

[0082] [수학적 2]

$$V = \frac{c\mu_{Li} - a\mu_{Li}}{nF}$$

[0083]

[0084] 여기서, F는 페러데이 상수이고, n은 레독스 반응에 포함된 Li 몰의 수이다.  $c\mu_{Li}$  는 캐소드에서의 Li 화학적 전위를 나타내며,  $a\mu_{Li}$  는 캐소드에서의 Li 메탈로서 Li 화학적 전위를 지시한다.

[0085] 도 19에서 설명한 분석 윈도우에서, 전위 버튼(1930)이 선택되면, 상술한 수식들의 계산을 기반으로 탈리 전위에 대한 그래프가 윈도우 상에 출력될 수 있다.

[0086] 도 27은 본 발명의 실시예에 따른 자유 에너지를 설명하는 도면이다.

[0087] 자유 에너지 계산을 위하여, 완화 섹션 전에 구조에 대한 완화가 수행된다. 도 19에서 설명한 분석 윈도우에서, "자유 에너지"버튼(1940)이 선택되면, 도시된 바와 같이 자유 에너지 윈도우 상의 자유 에너지 도면이 출력될 수 있다.

[0088] 도 28은 본 발명의 실시예에 따른 페이지 필드를 설명하는 도면이며, 도 29는 본 발명의 실시예에 따른 페이지 필드의 입력 상태 윈도우를 보다 상세히 나타낸 도면이고, 도 29는 본 발명의 실시예에 따른 페이지 필드의 입력 상태 윈도우를 보다 상세히 나타낸 도면이다. 도 30은 본 발명의 실시예에 따른 방전 및 충전에 따른 상태 표시를 나타낸 도면이고, 도 31은 본 발명의 실시예에 따른 작업 모델링의 기하학적 구조의 다양한 예를 나타낸



도면이다.

[0089] 페이지 필드 모델링(PFM, Phase Field Modeling) 시뮬레이션은 마이크로 구조들에서 방전 및 충전이 시뮬레이션 될 수 있다. PFM 시뮬레이션은, 구조의 다양한 형태에서의 용량 비교를 통해 캐소드의 효율을 개선할 수 있다. PFM 시뮬레이션에서는 C-H 방정식(Chan-hilliard equation)이 이용된다.

[0090] 방정식에서,  $\mu$ 는 화학적 전위를 나타내며, 화학적 에너지  $f(c)$  및 경계 에너지  $0.5h|\nabla c|^2$ 의 유도에 의해 작성 된다.

[0091] C-H 방정식은 다음 수학적 식 3과 같다.

[0092] [수학적 식 3]

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot [D \nabla \mu], \mu = f'(c) - h \nabla^2 c$$

[0093]

[0094] C-H 방정식을 위한 경계 조건(Boundary condition)은 입자 표면에서의 플럭스(J)는 충방전 전류 밀도  $i_{loc}$  와 관련된다.

[0095] 경계 조건은 다음 수학적 식 4에서와 같이 표현될 수 있다.

[0096] [수학적 식 4]

$$J = -D \nabla c = i_{loc} / F$$

[0097]

[0098] 여기서, F는 페러데이 상수이다.

[0099] 플럭스(J)의 줄 열(Joule heat)은 다음 수학적 식 5에서와 같이 표현될 수 있다.

[0100] [수학적 식 5]

$$\dot{q} = i_{loc} \eta$$

[0101]

[0102] 여기서,  $i_{loc}$ 는 지역 전류 밀도이다.  $i_{loc}$ 는 다음 수학적 식 6 또는 수학적 식 7에서와 같이 표현될 수 있다.

[0103] [수학적 식 6]

$$i_{loc} = \frac{\text{Maximum specific capacity} \times \frac{c - \text{rate}}{1 \text{ hour}}}{\text{Active area}} \times \text{Volume} \times \text{Density}$$

[0104]

[0105] [수학적 식 7]

$$i_{loc} = F k_0 c^\beta (c_{max} - c)^{1-\beta} c_i^{1-\beta} \left\{ \exp \left[ \frac{(1-\beta)F}{RT} \eta \right] - \exp \left[ -\frac{\beta F}{RT} \eta \right] \right\}$$

[0106]

[0107] 여기서,  $\eta$ 는 과전위, F는 Faraday constant (96485 C/mol),  $k_0$ 는 표면 전기화학적 반응을 상수, c는 표면 Li 이온 농도,  $c_{max}$ 는 Li 이온 농도 최대치,  $\beta$ 는 양극전송 계수 (=0.5), R은 기체 상수 (=8.314 J/mol/K), T는 온도이다.

[0108] 줄 열과 관련된 열 방정식은 다음 수학적 식 8과 같다.

[0109] [수학식 8]

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\kappa \nabla T) + \dot{q}$$

[0110]

[0111] 여기서,  $\rho$  은 밀도,  $c_p$  는 지정된 열 용량,  $\kappa$  는 열전도율이 될 수 있다.

[0112]

앞서 도 19에서 설명한 분석 윈도우에서, "Phase"버튼(1950)이 클릭되면, 도 28에 도시된 바와 같은 페이지 필드 모델이 새 윈도우에 표시될 수 있다. 페이지 필드 모델은 상술한 수식들을 기반으로 모델링될 수 있다. 페이지 필드는 도시된 바와 같이 입력 상태 윈도우 영역 및 결과 윈도우 영역을 포함할 수 있다. 입력 상태 윈도우를 통하여, 시뮬레이션하는 물질의 명칭, 시뮬레이션 종류(예: 충전 또는 방전), 기하학적 구조, C-rate, 시간 등을 확인할 수 있다.

[0113]

물질은 작업 페이지 및 DFT(Density Functional Theory) 데이터로부터 획득된 특성을 위해 선택된 물질일 수 있다. DFT 시뮬레이션은 상거동, 구조적 안정성, 전기화학적 전압, 레독스 반응을 위한 전기적 특성을 예측하고, 새로운 캐소드를 설계하기 위해 실행된다. 시뮬레이션 과정은 도 30에 도시된 바와 같이 방전 및 충전 과정을 나타낼 수 있다. 과정 선택에 따라, 도시된 바와 같은 이미지가 시각화 윈도우 등에 출력될 수 있다. 기하학적 구조는 도 31에 도시된 바와 같이 큐빅, 실린더, 스피어, 다공성 스피어, 다면체, 접시 구조 등이 제공될 수 있다. 각각의 기하학적 구조와 관련하여, 큐브의 경우, 큐브 크기 선택과 관련한 입력 영역, 실린더의 경우 반경 및 깊이 선택과 관련한 입력 영역, 구의 경우 반경 선택과 관련한 입력 영역, 다공성 구의 경우 지름 및 공극률 선택과 관련한 입력 영역, 다면체의 경우 제한된 구 반경과 관련한 입력 영역, 접시의 경우 형태, 깊이 및 크기 선택과 관련한 입력 영역이 입력 상태 윈도우에서 출력될 수 있다.

[0114]

충방전율(C-rate)은 1시간 동안의 배터리 용량과 같은 충전율 또는 방전율을 나타낸다. 고용량 C-rate 조건이 세팅되면, 방전 과정은 짧은 시간 내에 종료될 수 있다. 시간(Time)은 작업을 위해 사용자가 설정하는 시간이 될 수 있다. 방전 과정이 완료되면, 작업은 세팅 시간에 도달하지 않아도 종료될 수 있다.

[0115]

도 32는 본 발명의 실시예에 따른 결과 윈도우 중 Li Fraction과 관련한 도면이며, 도 33은 본 발명의 실시예에 따른 결과 윈도우 중 Phase Distribution과 관련한 도면이고, 도 34는 본 발명의 실시예에 따른 결과 윈도우 중 2D Plot과 관련한 도면이다.

[0116]

결과 윈도우의 좌측 상단에는 Li fraction 탭(3201), phase distribution 탭(3202) 및 2d plot 탭(3203)이 배치될 수 있다. 결과 윈도우의 좌측 상단에 배치된 탭을 클릭하면, 도 32 내지 도 34에 나타난 Li fraction, phase distribution 및 2d plot 정보가 출력될 수 있다. 예컨대, 도 32 및 도 33에 도시된 바와 같이 Li fraction 탭(3201) 또는 phase distribution 탭(3202) 선택에 대응하여 결과 윈도우의 좌측에 작업의 Li 이온 프랙션 또는 페이지 분포를 보이는 시각화 윈도우가 배치될 수 있다. 결과 윈도우의 우측에는 2차원 슬라이스 플랜 시각화 윈도우가 표시될 수 있다. 슬라이스 플랜의 위치 및 방향은 좌하단에 배치된 xy, yz, zx 및 스크롤 바 버튼에 의해 변화될 수 있다. 상술한 결과 윈도우에서 보이는 화면은 입력 장치의 입력 신호(예: 마우스 동작)에 따라 변경될 수 있다. 예컨대, 마우스의 중앙 휠 스크롤링은 줌인/줌아웃 기능, 마우스의 좌측 버튼 드래그는 뷰 각도 변경 기능, 마우스의 우측 버튼 드래그는 이미지 이동 기능이 수행될 수 있다. 좌측 하단 코너의 3개의 버튼들, x, y, z는 +x, +y, +z축으로 이미지를 정렬하는데 이용될 수 있다.

[0117]

결과 윈도우에서 2D plot 탭(3203) 선택에 대응하여, 도 34에 도시된 바와 같이 시뮬레이션 된 작업의 Li 프랙션 및 페이지 분포의 그래프들이 표시될 수 있다. 표시된 그래프는 Li 프랙션 결과를 시간에 대해 도시한 그래프 및 페이지 분포를 시간에 대해 도시한 그래프들을 포함한다. 이러한 Li fraction 및 phase distribution은 캐소드 볼륨에 의해 구분될 수 있다.

[0118]

도 35는 본 발명의 실시예에 따른 상태 밀도와 관련한 도면이고, 도 36은 본 발명의 실시예에 따른 상태 밀도 관련 정보 입력 영역을 나타낸 도면이다. 도 37은 본 발명의 실시예에 따른 통합된 상태 밀도를 나타낸 도면이고, 도 38은 본 발명의 실시예에 따른 선택된 케도의 모든 원자들의 상태 밀도를 나타낸 도면이며, 도 39는 본 발명의 실시예에 따른 모든 원자들의 조합된 상태 밀도를 나타낸 도면이다. 도 40은 본 발명의 실시예에 따른 특정 원자들의 통합된 상태 밀도를 나타낸 도면이고, 도 41은 본 발명의 실시예에 따른 특정 원자들의 선택된 케도에서의 상태 밀도를 나타낸 도면이며, 도 42는 본 발명의 실시예에 따른 특정 원자들의 조합된 상태 밀도를 나타낸 도면이다.

- [0119] 고체 물리학 및 응집물질물리학에서, 시스템의 상태 밀도는 채워질 수 있는 각 에너지 레벨에서의 에너지의 간격마다 상태들의 수로 설명된다. Li 이온 배터리 시스템에서, 전이 금속 산화물로부터 일반적인 레독스의 전기적 거동은 리튬 산화 또는 탈리 반응 동안 주요한 구동 힘이다. 즉, 전기적 구조와 거동들을 조사하기 위한 상태 밀도는 캐소드 물질 설계를 위해 이해되어야 한다.
- [0120] 상태 밀도(Density of states) 계산을 위하여, 완화 섹션 전에 구조에 대한 완화가 수행될 수 있다. 도 19에서 설명한 분석 윈도우에서, "상태 밀도" 버튼(1960)이 선택되면, 도 35에 도시된 바와 같이 상태 밀도와 관련한 윈도우에 표시된다.
- [0121] 상태 밀도 윈도우에서 원자 그리기와 관련하여, 도 36에 도시된 바와 같이 그리기 원자들 전체 또는 지정된 원자를 선택하는 항목과, 궤도 선택 영역을 포함하는 입력 영역이 표시될 수 있다. 모든 원자 또는 지정된 원자의 상태 밀도를 보일지 여부를 선택하는 항목(Atoms to draw)이 체크되면, 사용자는 궤도 그리기(Orbitals to draw)에서 박스들을 체크하여 통합 상태들 중 지정된 궤도를 선택할 수 있다.
- [0122] 상태 밀도 관련 정보 입력 영역 중 원자 그리기(Atoms to draw)에서 "All" 항목(3701)이 선택되고, 궤도 그리기(Orbitals to draw)에서 "All" 항목(3702)이 선택되며, "Draw"(3703)가 선택되면, 도 37에 도시된 바와 같이 상태 밀도 시각화 윈도우(3704)는 모든 원자들의 통합된 상태 밀도를 표시한다.
- [0123] 상태 밀도 관련 정보 입력 영역 중 원자 그리기(Atoms to draw)에서 "All" 항목(3801)이 선택되고, 궤도 그리기(Orbitals to draw)에서 "s" 항목(3802)이 선택되며, "Draw"(3803)가 선택되면, 도 38에 도시된 바와 같이 상태 밀도 시각화 윈도우(3804)는 선택된 궤도의 모든 원자들의 상태 밀도를 표시할 수 있다.
- [0124] 상태 밀도 관련 정보 입력 영역 중 원자 그리기(Atoms to draw)에서 "All" 항목(3901)이 선택되고, 궤도 그리기(Orbitals to draw)에서 "All" 항목(3702), "s" 항목(3703), "d<sub>xy</sub>" 항목(3704)이 선택되며, "Draw"(3905)가 선택되면, 도 39에 도시된 바와 같이 상태 밀도 시각화 윈도우(3906)는 조합된 모든 상태 밀도를 표시할 수 있다.
- [0125] 상태 밀도 관련 정보 입력 영역 중 원자 그리기(Atoms to draw)에서 "Atom" 항목(4001)이 선택되고, 궤도 그리기(Orbitals to draw)에서 "All" 항목(4002)이 선택되며, "Draw"(4003)가 선택되면, 도 40에 도시된 바와 같이 "Atom" 항목(4001)에 입력된 원자에 대한 특정 원자의 통합된 상태 밀도가 상태 밀도 시각화 윈도우(3904)에 표시될 수 있다. 선택된 원자의 이름은 원자 그리기(Atoms to draw)에서처럼 원자(Atom) 옆에 표시된다.
- [0126] 상태 밀도 관련 정보 입력 영역 중 원자 그리기(Atoms to draw)에서 "Atom" 항목(4101)이 선택되고, 궤도 그리기(Orbitals to draw)에서 "py" 항목(4102)이 선택되며, "Draw"(4103)가 선택되면, 도 41에 도시된 바와 같이 "Atom" 항목(4101)에 입력된 원자에 대한 특정 원자들의 선택된 궤도에서의 상태 밀도가 상태 밀도 시각화 윈도우(3904)에 표시될 수 있다.
- [0127] 상태 밀도 관련 정보 입력 영역 중 원자 그리기(Atoms to draw)에서 "Atom" 항목(4201)이 선택되고, 궤도 그리기(Orbitals to draw)에서 "All" 항목(4202) 및 "py" 항목(4203)이 선택되며, "Draw"(4203)가 선택되면, 도 42에 도시된 바와 같이 "Atom" 항목(4201)에 입력된 원자에 대한 특정 원자들의 조합된 상태 밀도가 상태 밀도 시각화 윈도우(3904)에 표시될 수 있다.
- [0128] 도 43은 본 발명의 실시예에 따른 가상 캐소드 시뮬레이션 방법을 설명하는 도면이다.
- [0129] 도 43을 참조하면, 본 발명의 실시예에 따른 가상 캐소드 시뮬레이션 방법은 4301 과정에서, 전자 장치(예: 사용자 장치 또는 서버)가 캐소드 물질 선택과 관련한 로비 페이지를 출력할 수 있다. 로비 페이지는 캐소드의 원자 구조 또는 작업의 마지막 배열을 나타내는 시각화 윈도우 영역, 사용자가 현재 프로젝트에서 진행하는 캐소드 리스트를 나타내는 결과 테이블 영역, 현재 프로젝트에서 실행 중인 작업들의 리스트이며 결과 테이블로부터 작업을 선택할 수 있는 카트 분석 테이블 영역 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0130] 4303 과정에서, 전자 장치는 페이지 전환과 관련한 사용자 입력이 수신되는지 확인할 수 있다. 전자 장치는 페이지 전환과 관련한 사용자 입력이 없는 경우 이전 과정 4301 상태를 유지할 수 있다. 4301 상태에서, 전자 장치는 사용자 입력에 따라 로비 페이지 운용을 처리할 수 있다.
- [0131] 페이지 전환(예: 작업 페이지로의 전환)과 관련한 사용자 입력이 발생하면, 4305 과정에서, 전자 장치는 캐소드 물질 설계와 관련한 작업 페이지를 출력할 수 있다. 작업 페이지는 캐소드 물질의 결정 구조 생성을 수행하는 결정 빌더 영역, 결정 빌더에서 생성된 결정 구조의 원자 구조를 나타내는 시각화 윈도우 영역, 원자 구조로부터의 화학량론 화학식 계산을 처리하는 대용량 계산 영역, 계산된 결과를 보이는 결과 영역, 캐소드 물질의 시

플레이팅을 수행하는 분석 영역, 캐소드 물질의 정보를 나열하는 정보 과학 영역 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0132] 4307 과정에서, 전자 장치는 페이지 전환(예: 로비 페이지로의 전환)과 관련한 사용자 입력이 발생하는지 확인할 수 있다. 페이지 전환과 관련한 입력이 발생하지 않으면, 4307 과정에서, 전자 장치는 캐소드 물질 설계와 관련한 종료 입력이 발생하는지 확인할 수 있다. 종료 입력이 발생하지 않으면, 전자 장치는 4305 이전으로 분기하여 이하 과정을 재수행할 수 있다. 4307 과정에서, 페이지 전환과 관련한 사용자 입력이 수신되면, 전자 장치는 4301 과정으로 분기하여 이하 과정을 재수행할 수 있다.

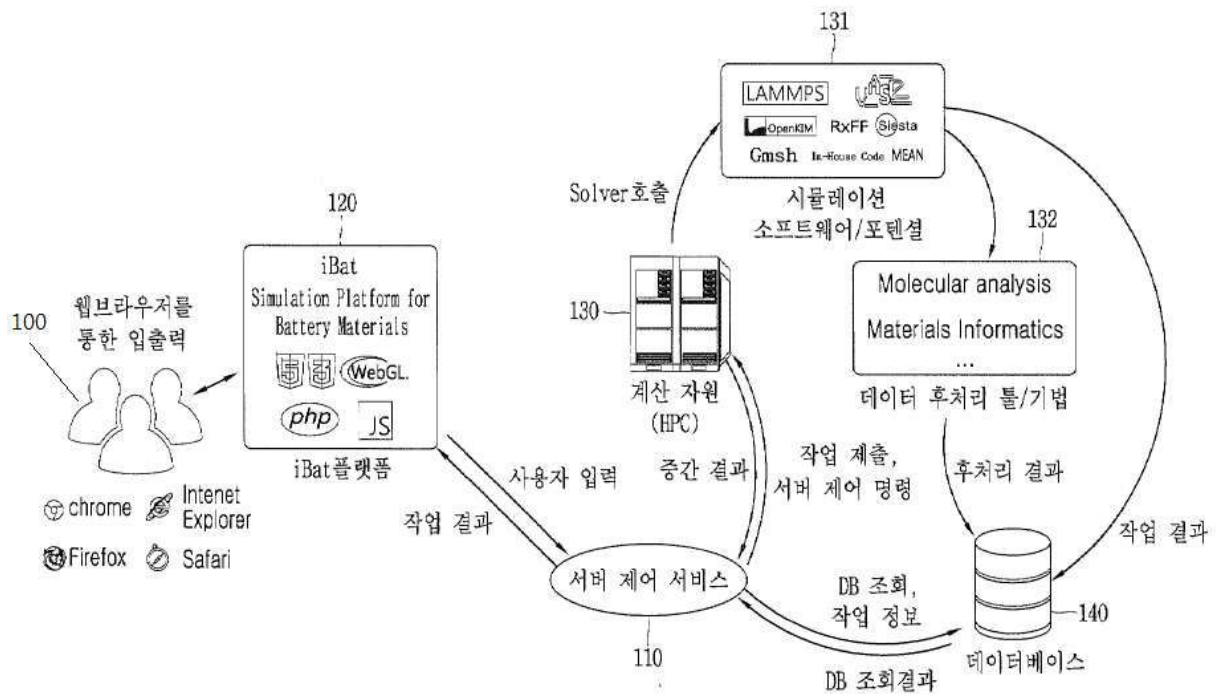
[0133] 한편, 본 명세서와 도면에 개시된 본 발명의 실시예들은 이해를 돕기 위해 특정 예를 제시한 것에 지나지 않으며, 본 발명의 범위를 한정하고자 하는 것은 아니다. 여기에 개시된 실시예들 이외에도 본 발명의 기술적 사상에 바탕을 둔 다른 변형 예들이 실시 가능하다는 것은, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자에게 자명한 것이다.

**부호의 설명**

- [0134] 사용자 장치 : 100
- 메인 서버 : 110
- 사용자 인터페이스 : 120
- 시뮬레이션 서버 : 130
- 데이터베이스 : 140

**도면**

**도면1**

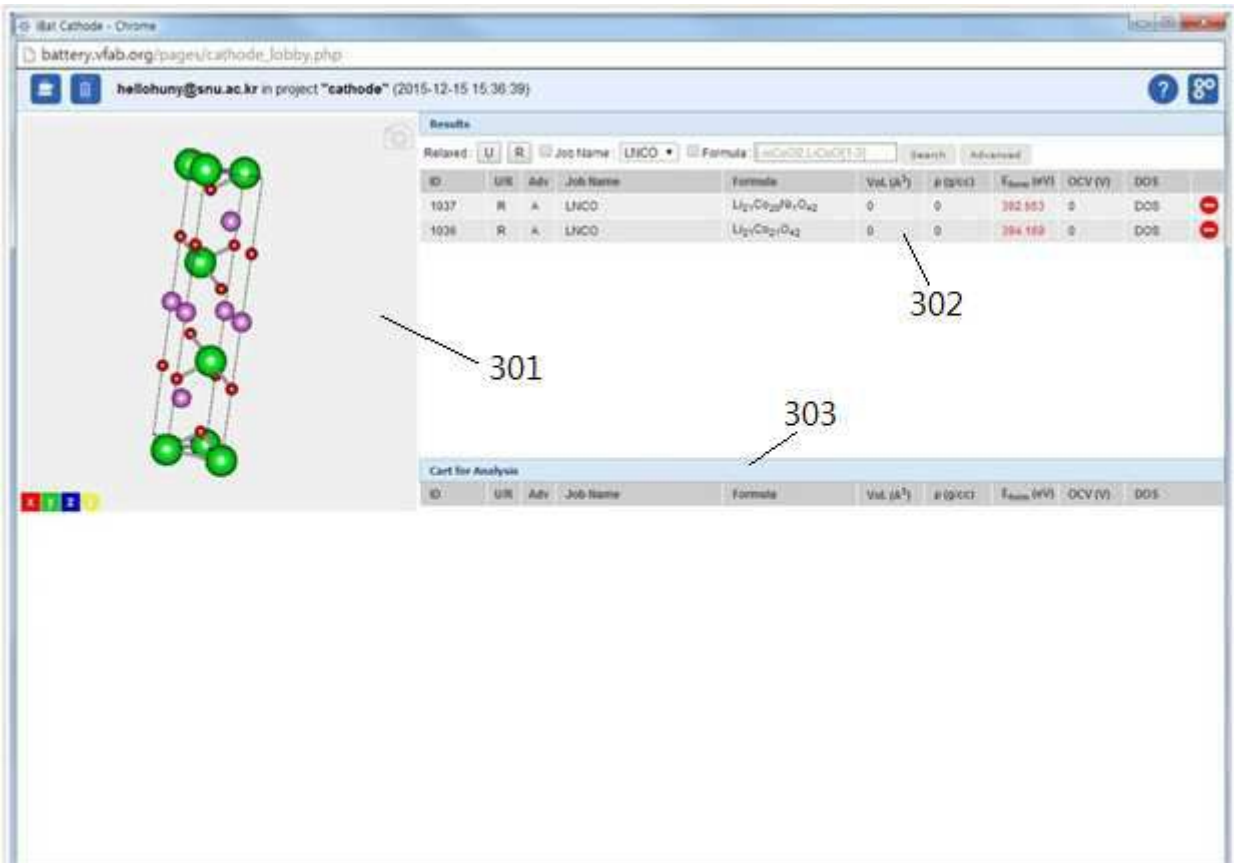




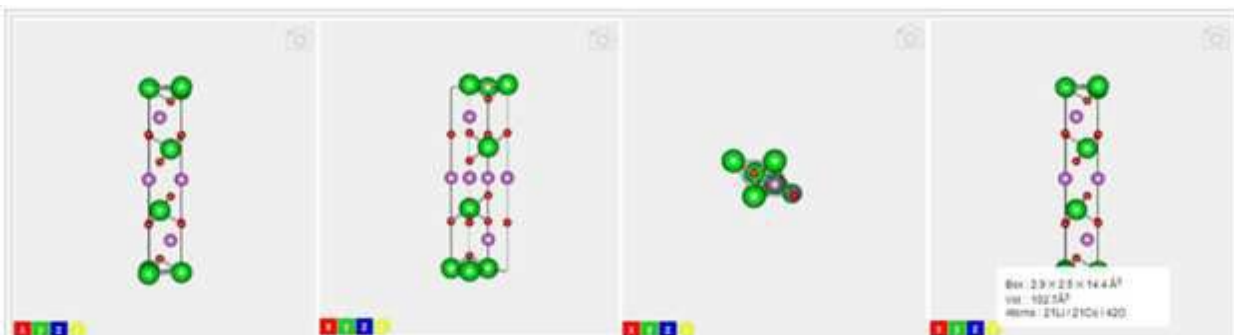
도면2



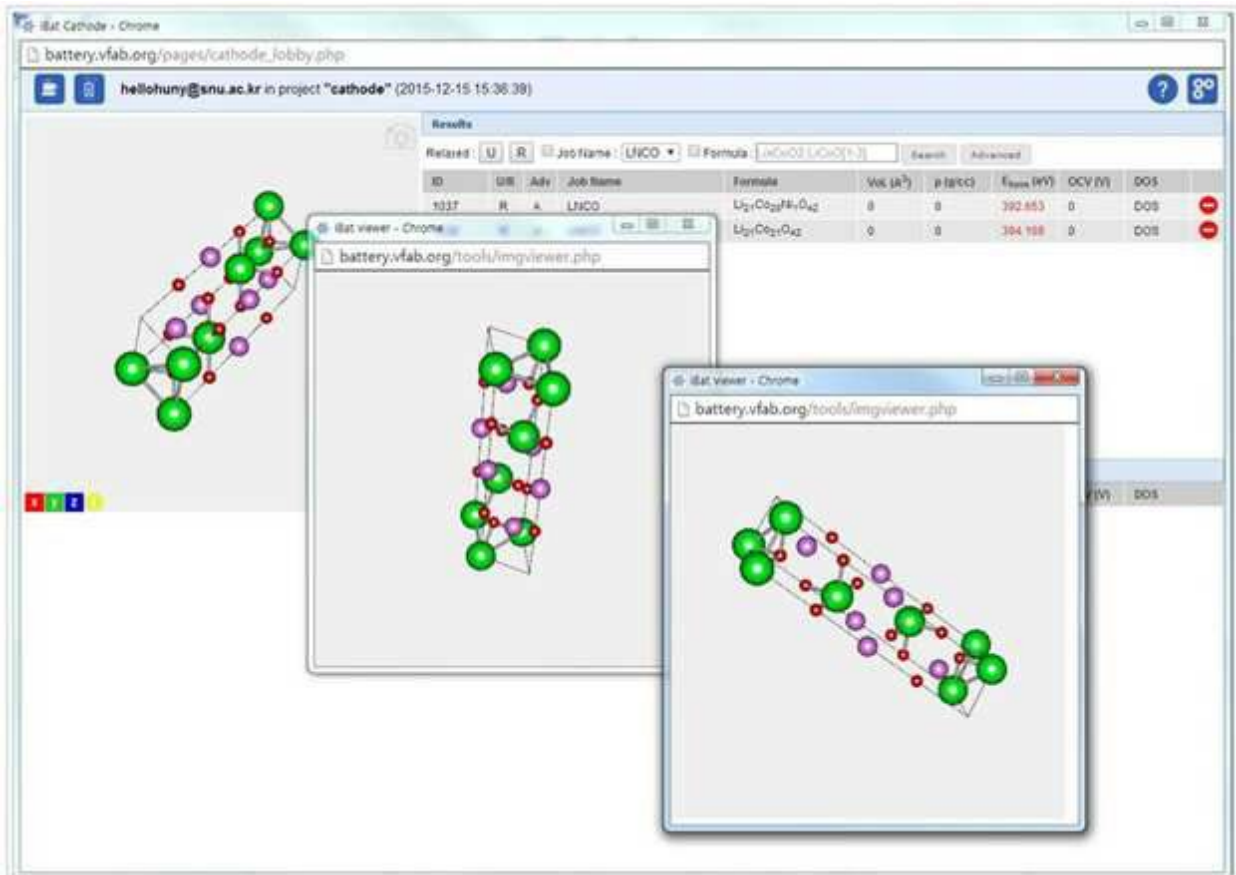
도면3



도면4



도면5



도면6

Results									
ID	U-R	Adv	Job Name	Formula	Vol. (Å <sup>3</sup> )	ρ (g/cc)	E <sub>form</sub> (eV)	OCV (V)	DOS
1037	R	A	LNCO	Li <sub>2</sub> Co <sub>20</sub> Ni <sub>1</sub> O <sub>42</sub>	0	0	392.653	0	DOS
1036	R	A	LNCO	Li <sub>2</sub> Co <sub>21</sub> O <sub>42</sub>	0	0	394.169	0	DOS

도면7

### Advanced Filter

<input type="checkbox"/> volume <input style="width: 40px;" type="text"/> ~ <input style="width: 40px;" type="text"/>	<input type="checkbox"/> band gap <input style="width: 40px;" type="text"/> ~ <input style="width: 40px;" type="text"/>
<input type="checkbox"/> density <input style="width: 40px;" type="text"/> ~ <input style="width: 40px;" type="text"/>	<input type="checkbox"/> E above hull <input style="width: 40px;" type="text"/> ~ <input style="width: 40px;" type="text"/>
<input type="checkbox"/> energy <input style="width: 40px;" type="text"/> ~ <input style="width: 40px;" type="text"/>	<input type="checkbox"/> E/atom <input style="width: 40px;" type="text"/> ~ <input style="width: 40px;" type="text"/>
<input type="checkbox"/> E <sub>form</sub> /atom <input style="width: 40px;" type="text"/> ~ <input style="width: 40px;" type="text"/>	<input type="checkbox"/> N <sub>element</sub> <input style="width: 40px;" type="text"/> ~ <input style="width: 40px;" type="text"/>
<input type="checkbox"/> N <sub>sites</sub> <input style="width: 40px;" type="text"/> ~ <input style="width: 40px;" type="text"/>	<input type="checkbox"/> OCV <input style="width: 40px;" type="text"/> ~ <input style="width: 40px;" type="text"/>

도면8

The screenshot shows the Cathode software interface. At the top, the browser address bar shows 'battery.vfab.org/pages/cathode\_lobby.php'. The user is logged in as 'hellohuny@snu.ac.kr' in project 'cathode' (2015-12-15 15:36:39). The main area displays a 'Results' table with columns: ID, UR, Adv, Job Name, Formula, Vol. (Å<sup>3</sup>), p (g/cc), F<sub>form</sub> (W), OCV (V), and DOS. Two rows are visible: ID 1037 and ID 1038. The row for ID 1038 is highlighted with a red dashed box, and a red arrow points to it with the text 'Click'. Below the table is a 'Cart for Analysis' section with a similar column structure. Callout 801 points to the 'Job Name' dropdown menu, and callout 802 points to the 'Cart for Analysis' header. On the left side, there is a 3D ball-and-stick model of a crystal structure.

ID	UR	Adv	Job Name	Formula	Vol. (Å <sup>3</sup> )	p (g/cc)	F <sub>form</sub> (W)	OCV (V)	DOS
1037	R	A	LNCO	U <sub>0.7</sub> Co <sub>0.25</sub> Fe <sub>0.05</sub> O <sub>2</sub>	0	0	380.153	0	DOS
1038	R	A	LNCO	U <sub>0.7</sub> Co <sub>0.2</sub> O <sub>2</sub>	0	0	394.158	0	DOS

도면9

801

802

ID	UR	Adv	Job Name	Formula	Vol. (Å <sup>3</sup> )	ρ (g/cm <sup>3</sup> )	T <sub>max</sub> (K)	OCV (V)	DOF
1037	R	A	LNCO	$L_{1.2}Co_{0.8}Ni_{0.4}O_{4.2}$	0	0	392.653	0	DOF
1038	R	A	LNCO	$L_{1.2}Co_{0.8}O_{4.2}$	0	0	394.118	0	DOF

ID	UR	Adv	Job Name	Formula	Vol. (Å <sup>3</sup> )	ρ (g/cm <sup>3</sup> )	T <sub>max</sub> (K)	OCV (V)	DOF
1038	R	A	LNCO	$L_{1.2}Co_{0.8}O_{4.2}$	0	0	394.118	0	DOF

도면10

1001

1002

1003

1004

1005

1006

ID	UR	Formula	Volume (Å <sup>3</sup> )	Density (g/cm <sup>3</sup> )	T <sub>max</sub> (K)	Status
1004						

도면11

**Crystal Builder**

Load CIF:  선택된 파일 없음

Space Group: Triclinic  P1

Lattice Parameter:  
 a:  b:  c:   
 α:  β:  γ:

Atomic Position

#	Element	x	y	z
1	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

Add

Build: N<sub>cell</sub> (X,Y,Z):

도면12

**Crystal Builder**

Load CIF:  선택된 파일 없음

Space Group: Trigonal  R-3m

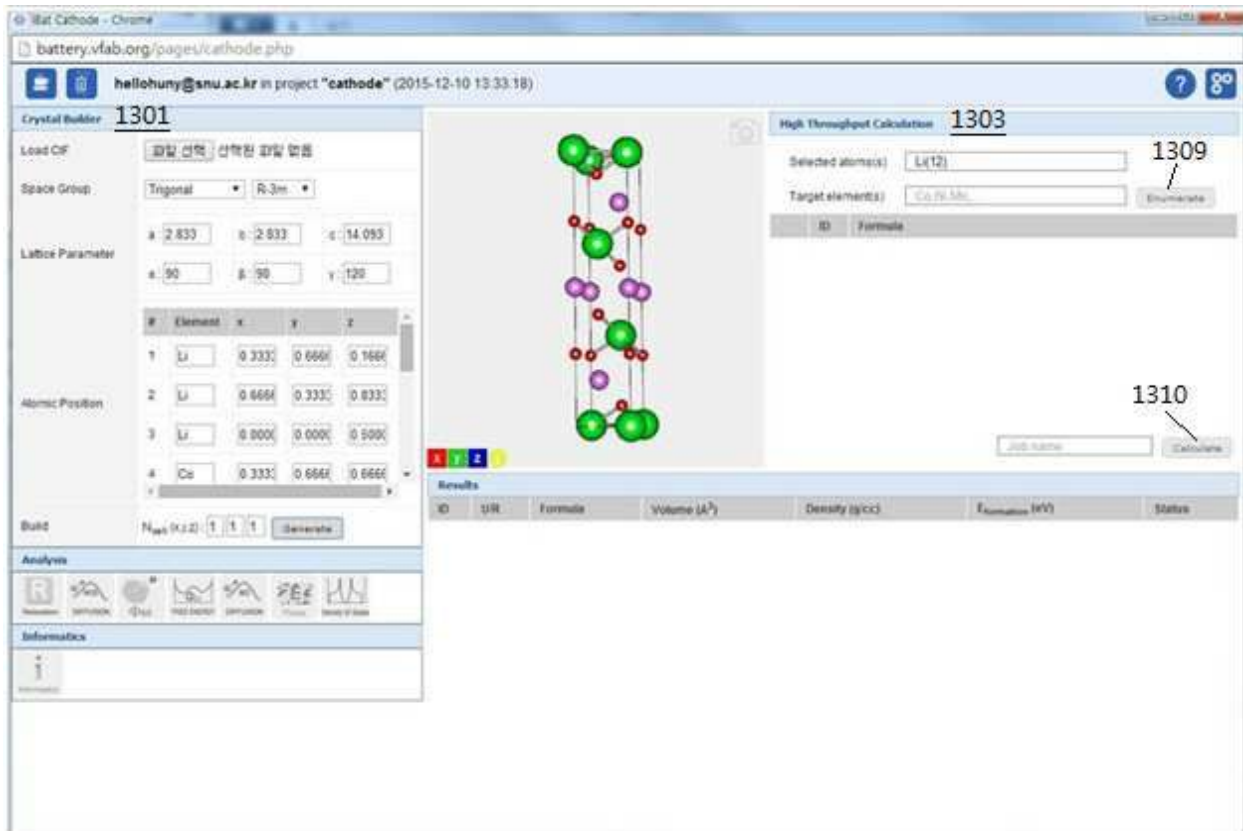
Lattice Parameter:  
 a:  b:  c:   
 α:  β:  γ:

Atomic Position

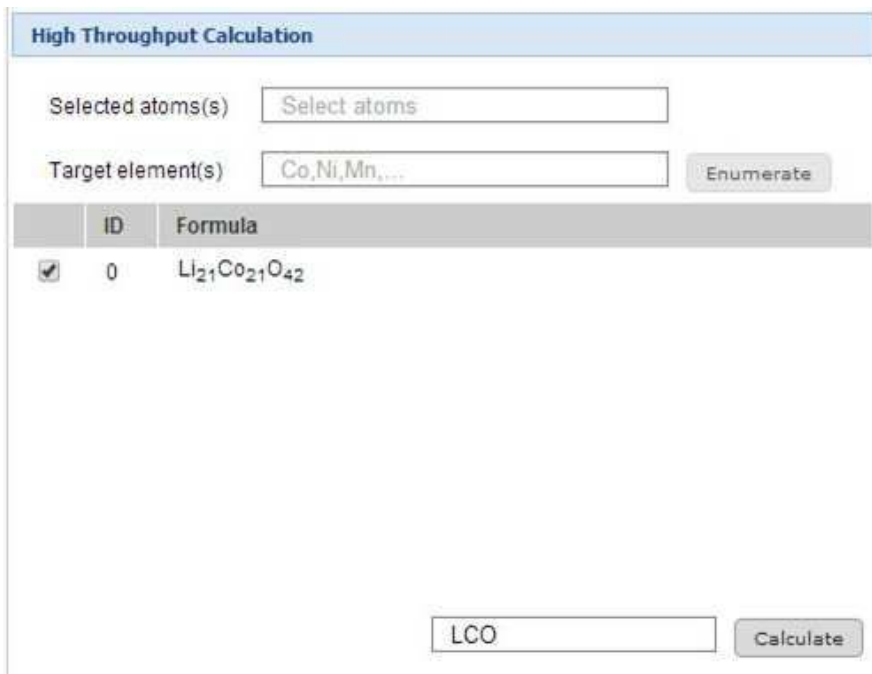
#	Element	x	y	z
1	Li	<input type="text" value="0.3333"/>	<input type="text" value="0.6666"/>	<input type="text" value="0.1666"/>
2	Li	<input type="text" value="0.6666"/>	<input type="text" value="0.3333"/>	<input type="text" value="0.8333"/>
3	Li	<input type="text" value="0.0000"/>	<input type="text" value="0.0000"/>	<input type="text" value="0.5000"/>
4	Co	<input type="text" value="0.3333"/>	<input type="text" value="0.6666"/>	<input type="text" value="0.6666"/>

Build: N<sub>cell</sub> (X,Y,Z):     1201

도면13



도면14



도면15

Results						
ID	U/R	Formula	Volume (Å <sup>3</sup> )	Density (g/cc)	E <sub>formation</sub> (eV)	Status
1021	U	Li <sub>21</sub> Co <sub>21</sub> O <sub>42</sub>		0	394.169	Cart

도면16

High Throughput Calculation

Selected atoms(s):

Target element(s):  Enumerate

ID	Formula
----	---------

Job name:  Calculate

1810

도면17

High Throughput Calculation

Selected atoms(s):  1710

Target element(s):  Enumerate

ID	Formula
<input checked="" type="checkbox"/> 0	Li <sub>21</sub> Co <sub>21</sub> O <sub>42</sub>
<input checked="" type="checkbox"/> 1	Li <sub>21</sub> Co <sub>20</sub> Ni <sub>1</sub> O <sub>42</sub>

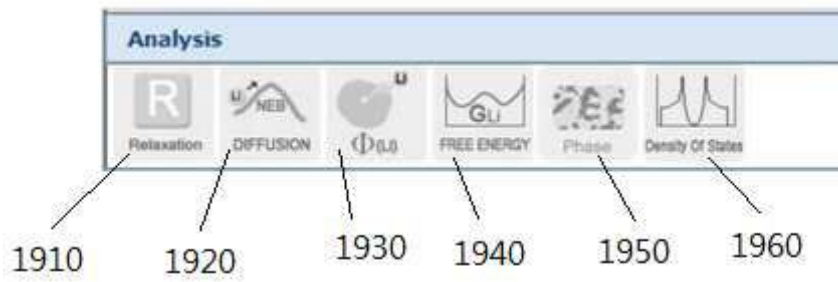
Job name:  Calculate 1720

도면18

Results						
ID	U/R	Formula	Volume (Å <sup>3</sup> )	Density (g/cc)	E <sub>formation</sub> (eV)	Status
1036	U	Li <sub>21</sub> Co <sub>21</sub> O <sub>42</sub>	null	0	N/A	.....
1037	U	Li <sub>21</sub> Co <sub>20</sub> Ni <sub>1</sub> O <sub>42</sub>	null	0	N/A	.....
1038	U	Co <sub>21</sub> O <sub>42</sub>	null	0	N/A	.....
1039	U	Co <sub>20</sub> Ni <sub>1</sub> O <sub>42</sub>	null	0	N/A	.....



도면19



도면20



도면21

Unrelaxed		Results				
ID	U/R	Formula	Volume (Å <sup>3</sup> )	Density (g/cc)	E <sub>formation</sub> (eV)	Status
1036	U	Li21Co21O42		0	394.169	Calc

↓  
R  
Relaxation  
↓

Relaxed		Results				
ID	U/R	Formula	Volume (Å <sup>3</sup> )	Density (g/cc)	E <sub>formation</sub> (eV)	Status
1036	R	Li21Co21O42		0	394.169	Calc



도면22

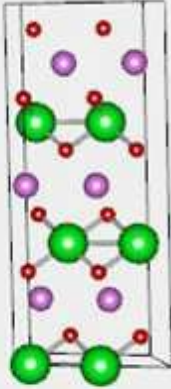
### Diffusivity(NEB)

Materials

From (atom)

To  Atom  Center

From	To	Status
(0.00,0.00,7.18)	(2.87,0.00,7.18)	Run



x
y
z
i

도면23

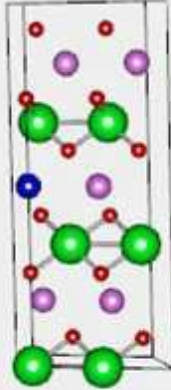
### Diffusivity(NEB)

Materials

From (atom)

To  Atom  Center

From	To	Status
(0.00,0.00,7.18)	(2.87,0.00,7.18)	Run



x
y
z
i

1 atom(s) selected

도면24

**Diffusivity(NEB)**

Materials:

From (atom):  ,  ,

To:  Atom  Center  2410

,  ,  2420

From	To	Status
(0.00,0.00,7.18)	(2.87,0.00,7.18)	Run

도면25

**Diffusivity(NEB)**

Materials:

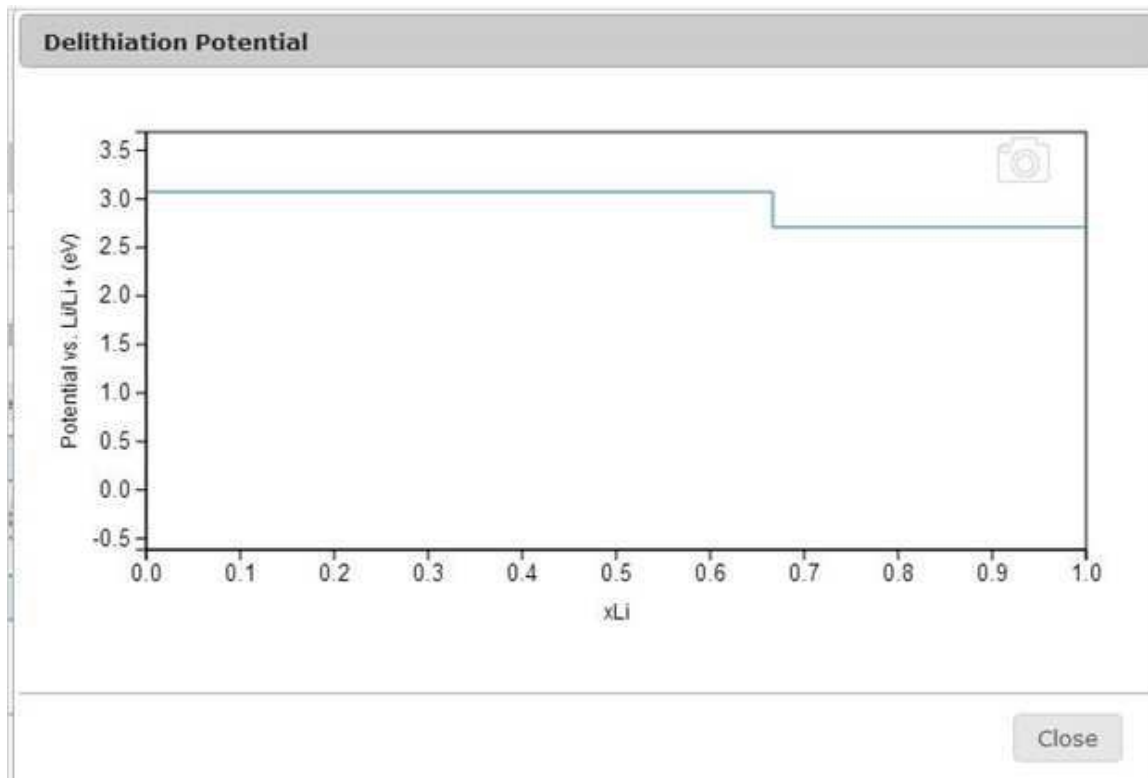
From (atom):  ,  ,

To:  Atom  Center

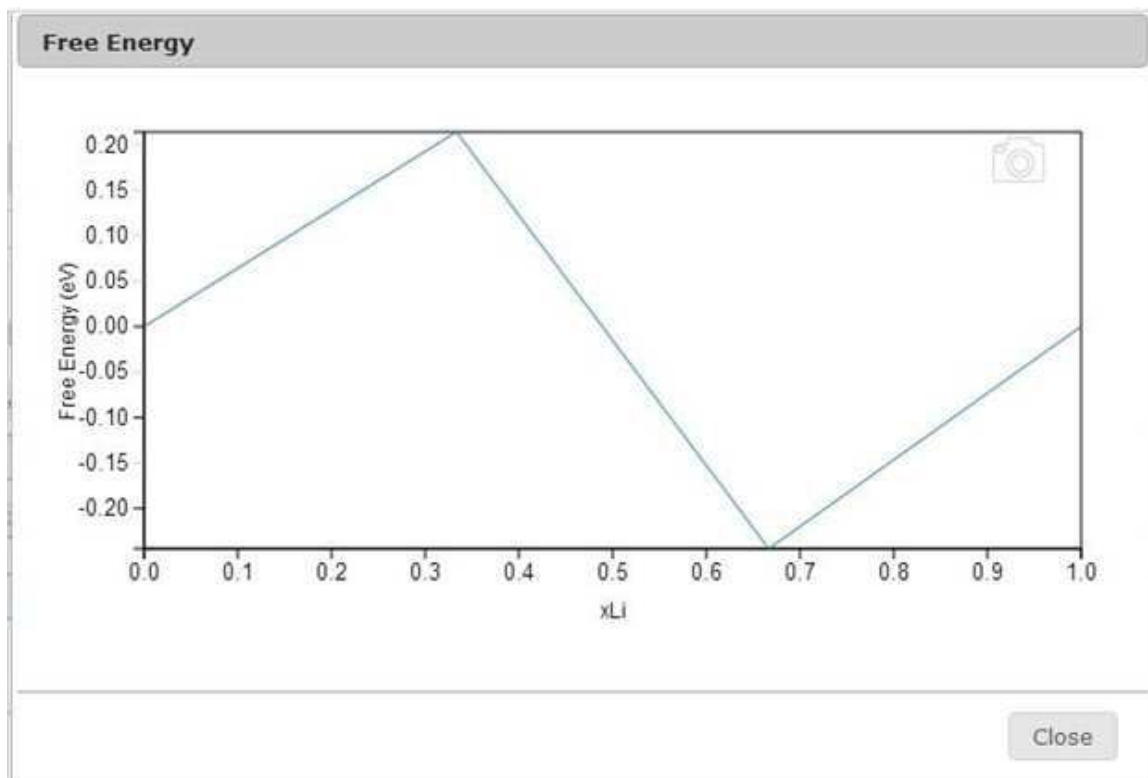
,  ,

From	To	Status
(0.00,0.00,7.18)	(2.87,0.00,7.18)	Fin.

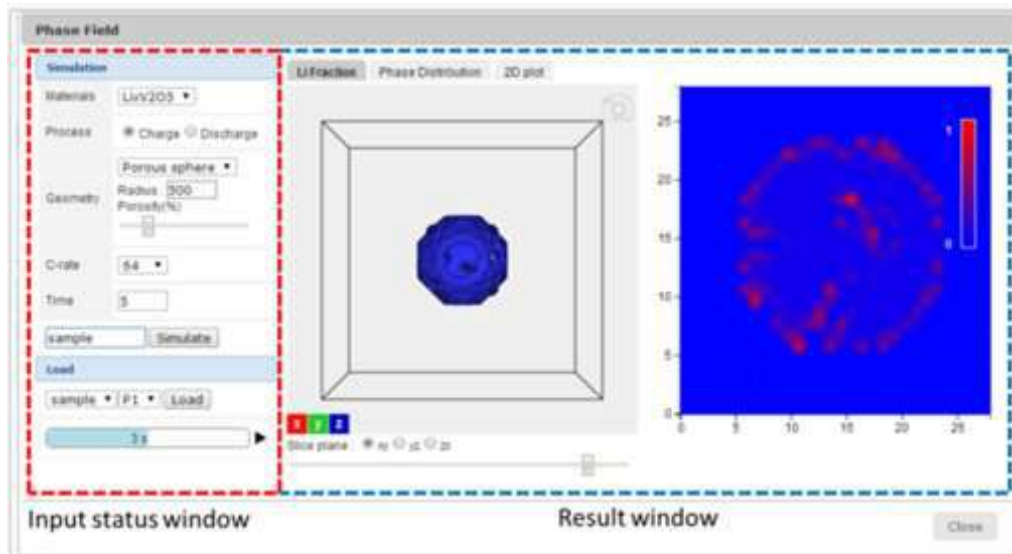
도면26



도면27



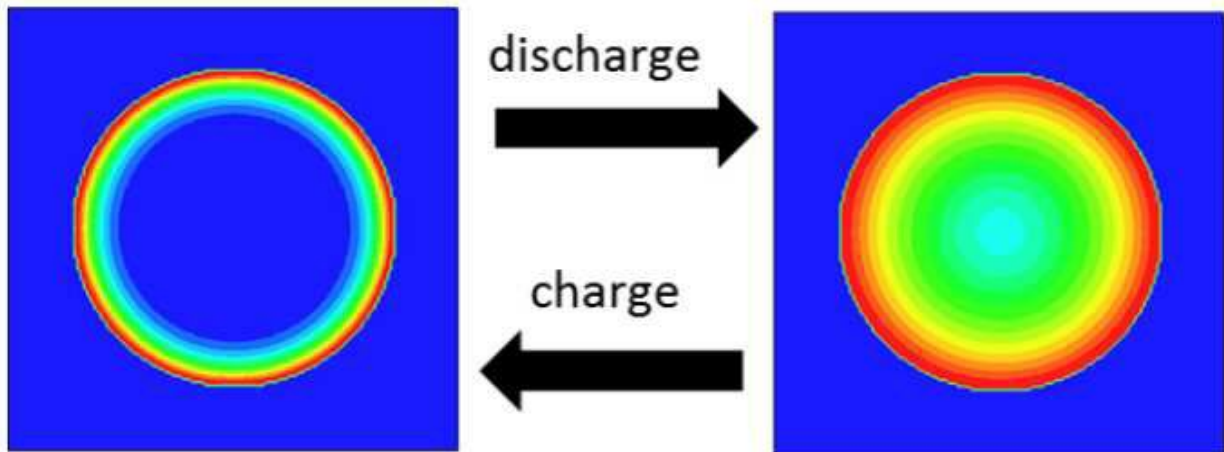
도면28



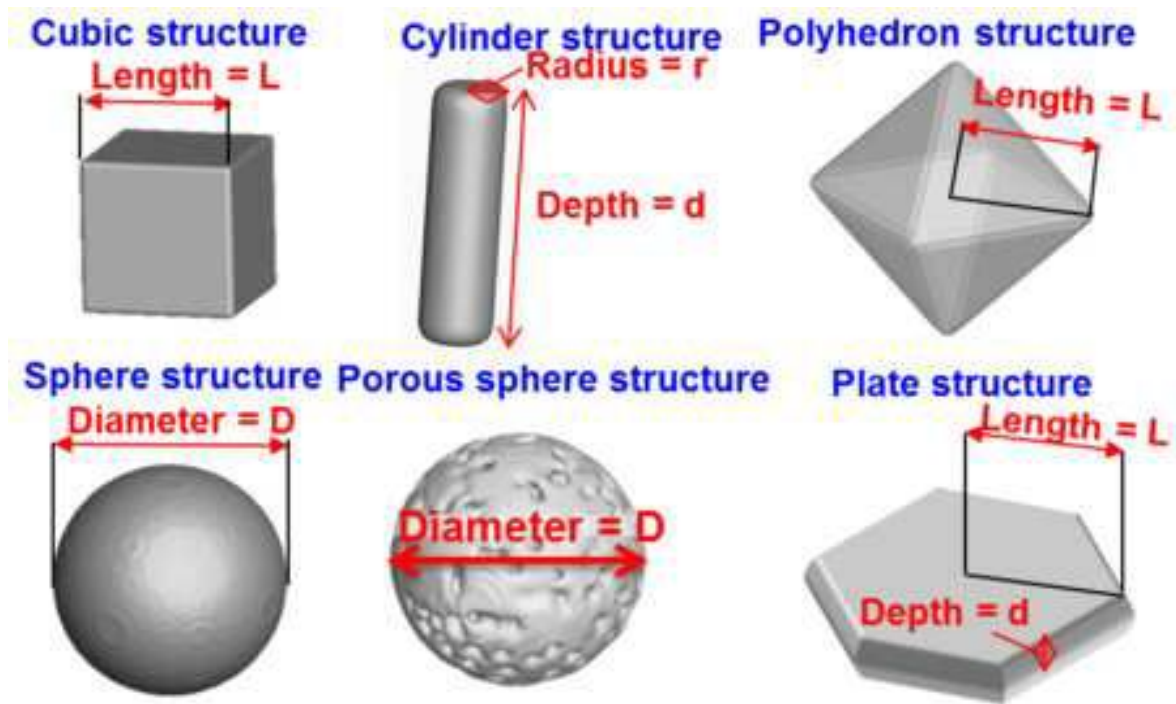
도면29

Simulation	
Materials	LixV2O5 ▼
Process	<input checked="" type="radio"/> Charge <input type="radio"/> Discharge
Geometry	Porous sphere ▼
	Radius : 500 Porosity(%) <input type="range"/>
C-rate	64 ▼
Time	5
	sample <input type="text"/> Simulate
Load	
	sample ▼ P1 ▼ Load
	<input type="range" value="3 s"/>

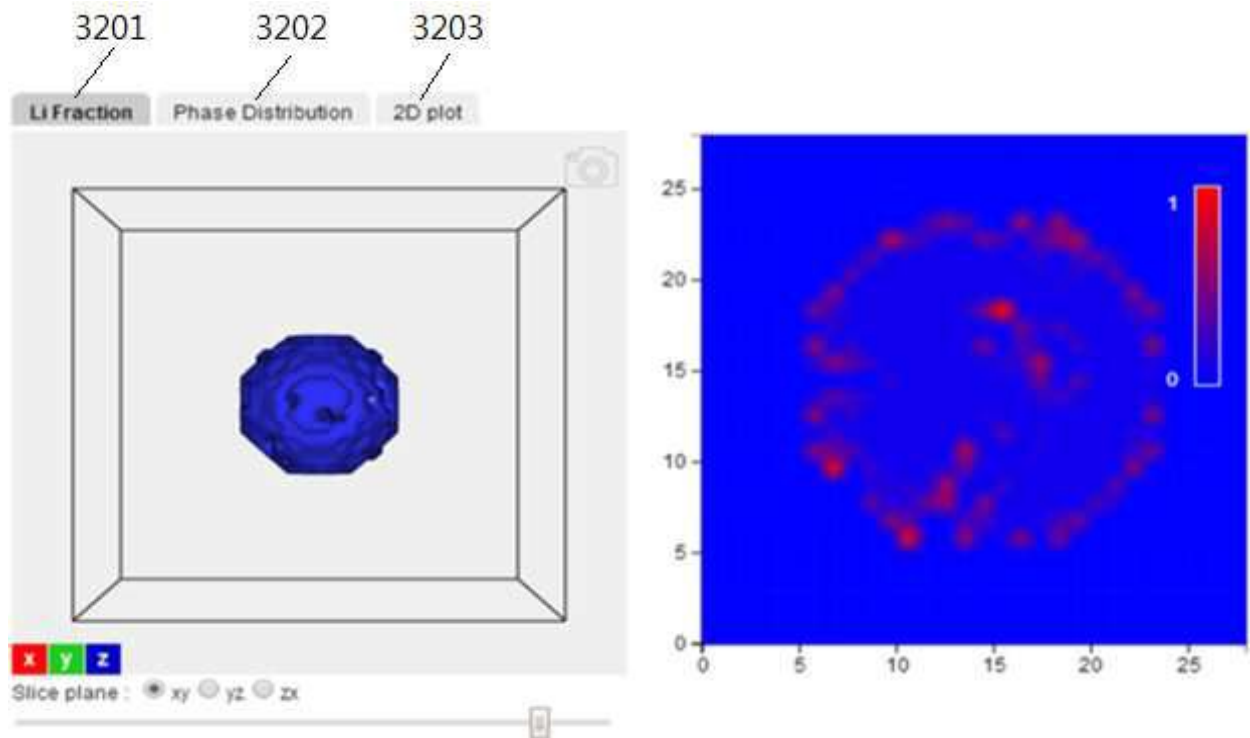
도면30



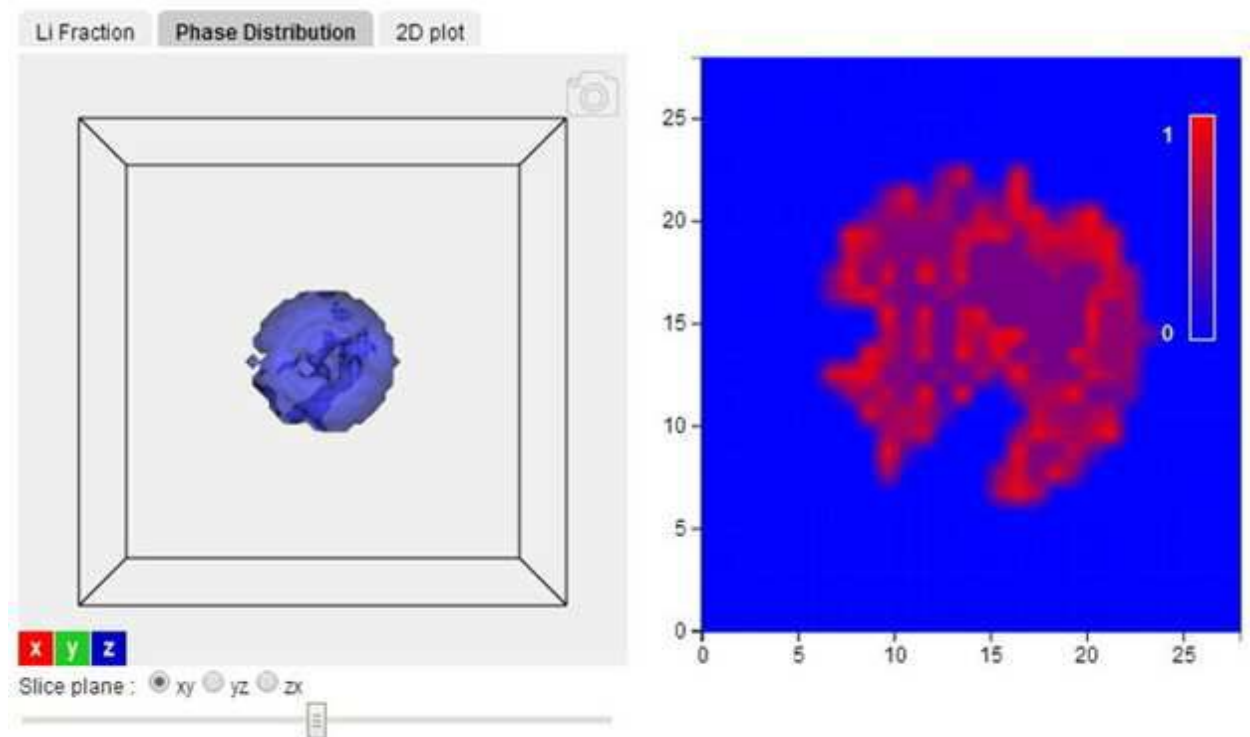
도면31



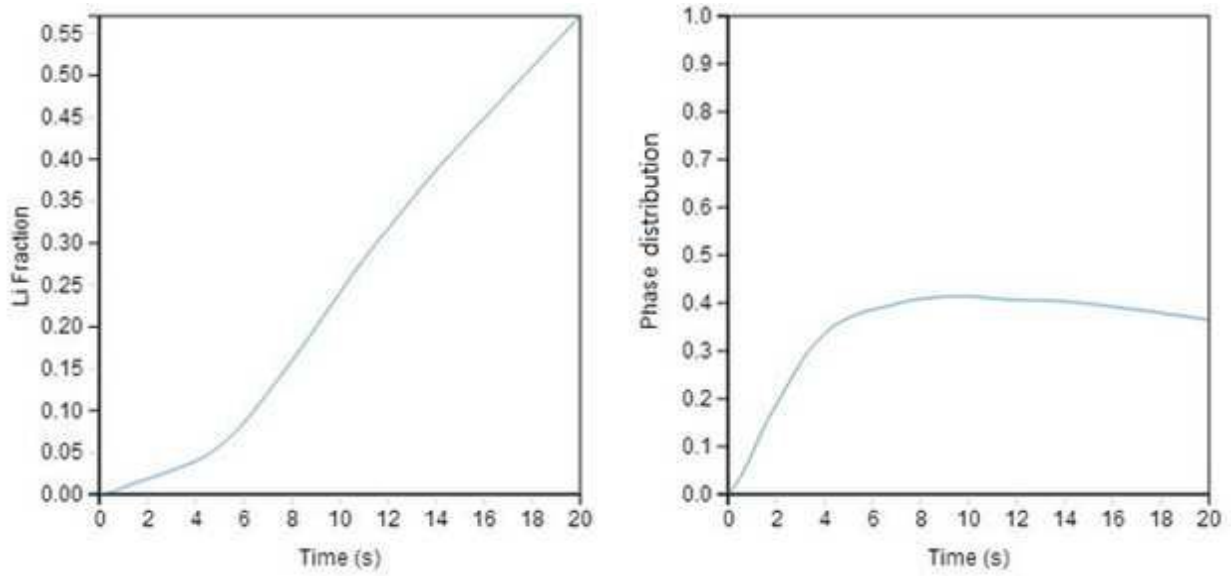
도면32



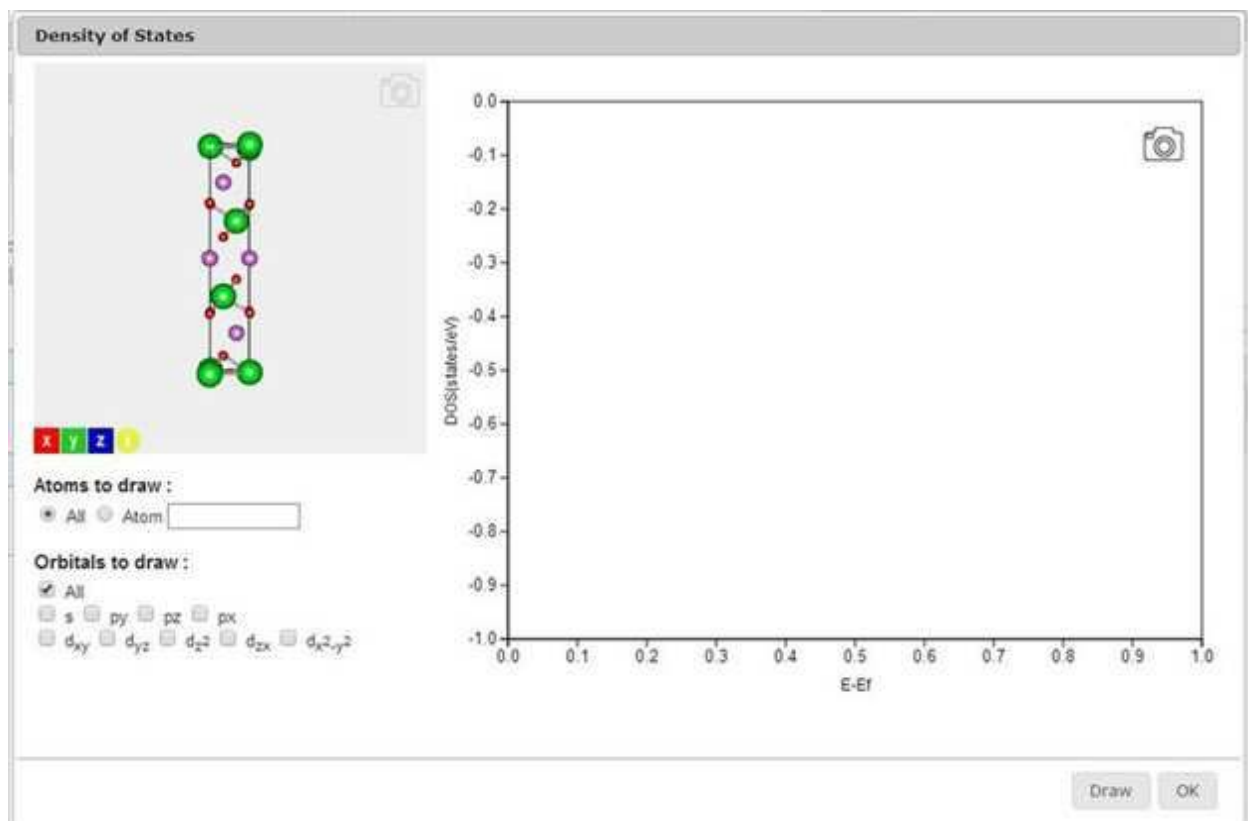
도면33



도면34



도면35

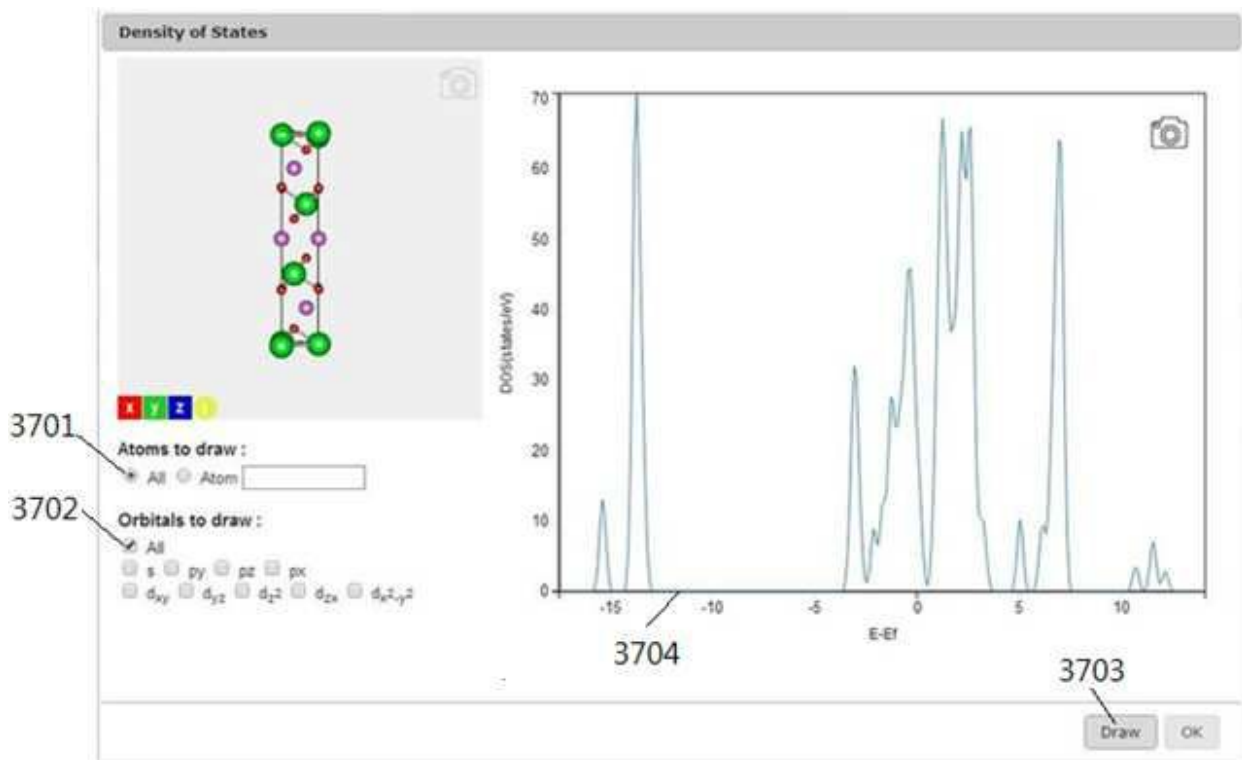


도면36

**Atoms to draw :**  
 All  Atom

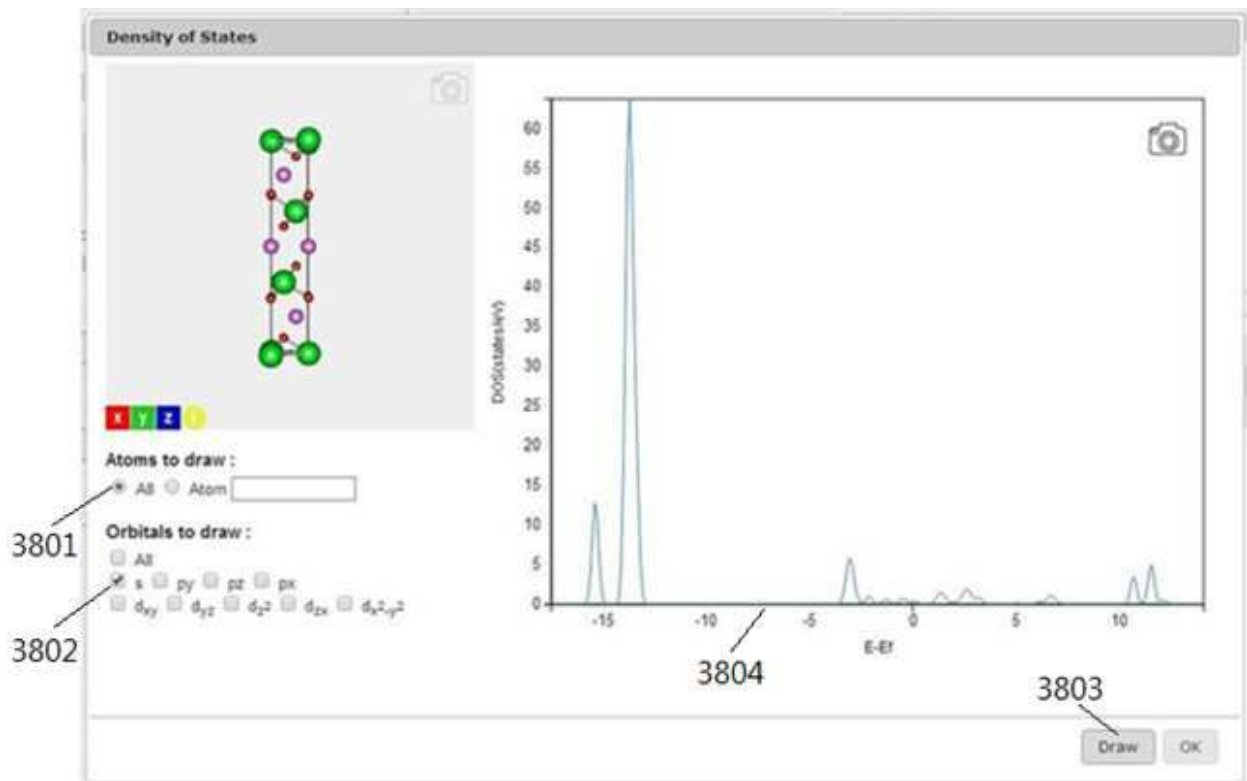
**Orbitals to draw :**  
 All  
 s  py  pz  px  
 d<sub>xy</sub>  d<sub>yz</sub>  d<sub>z<sup>2</sup></sub>  d<sub>zx</sub>  d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>

도면37

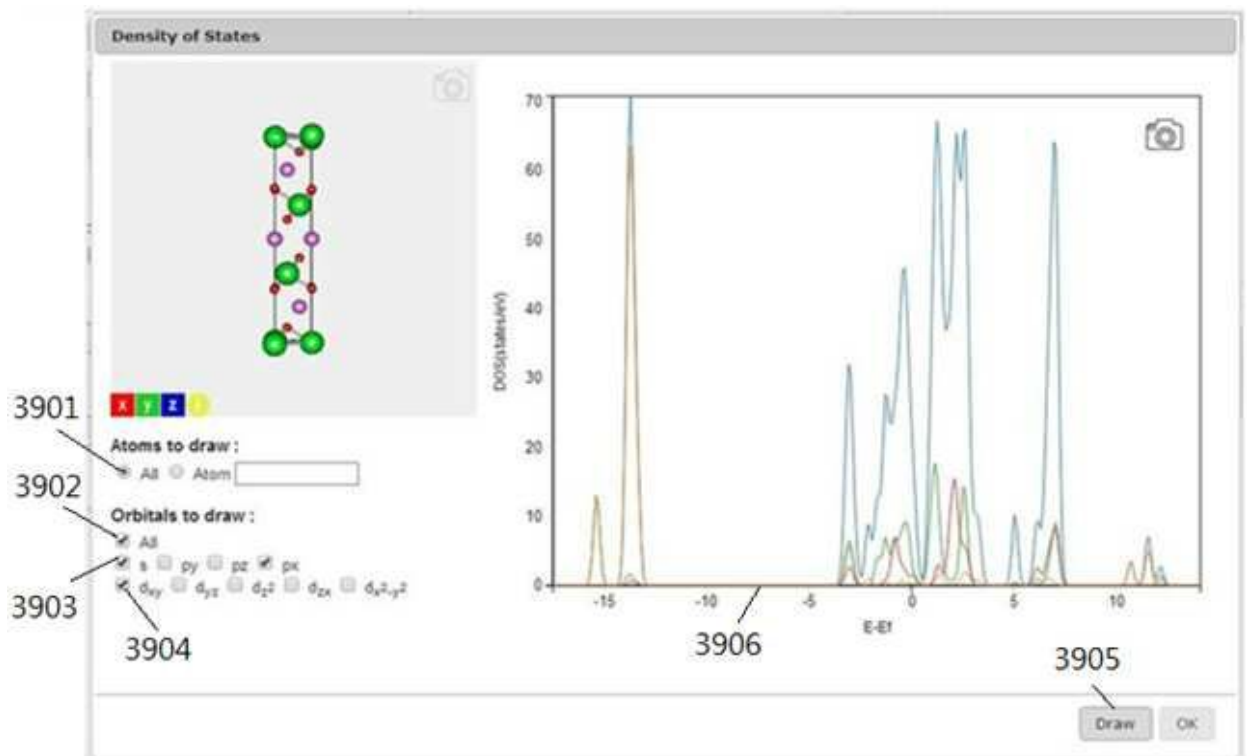




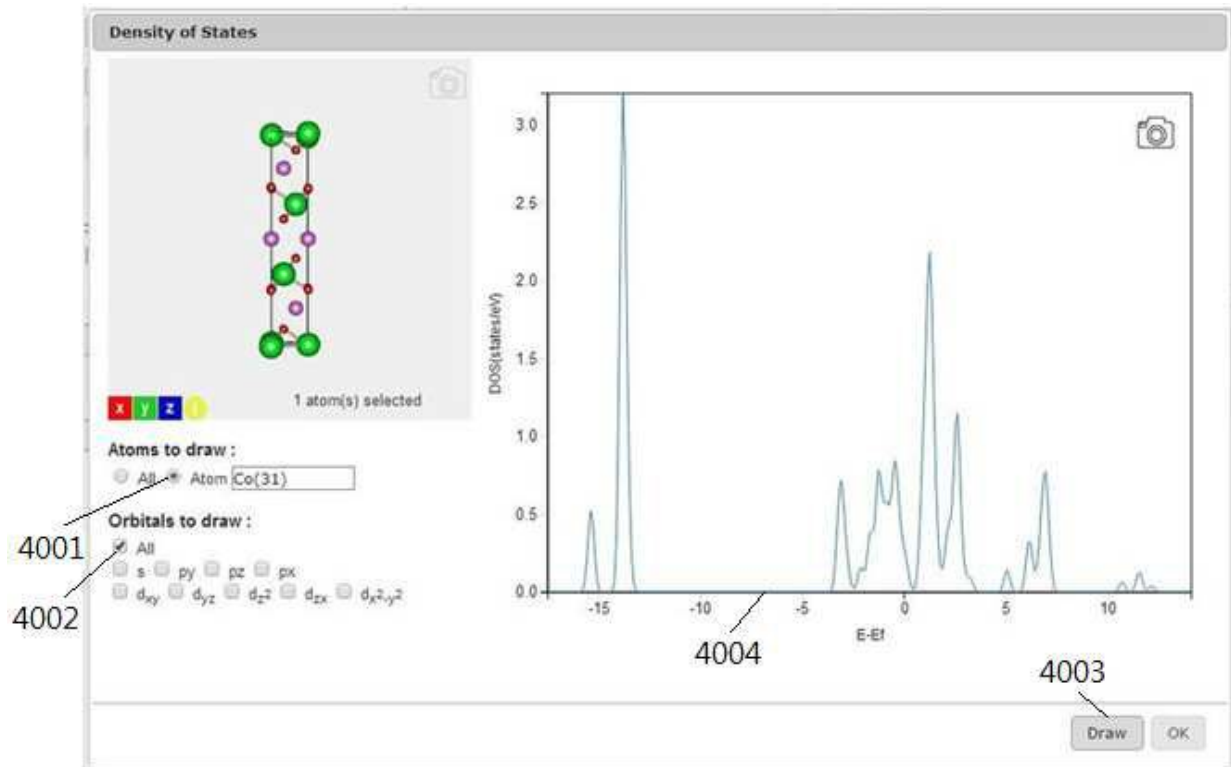
도면38



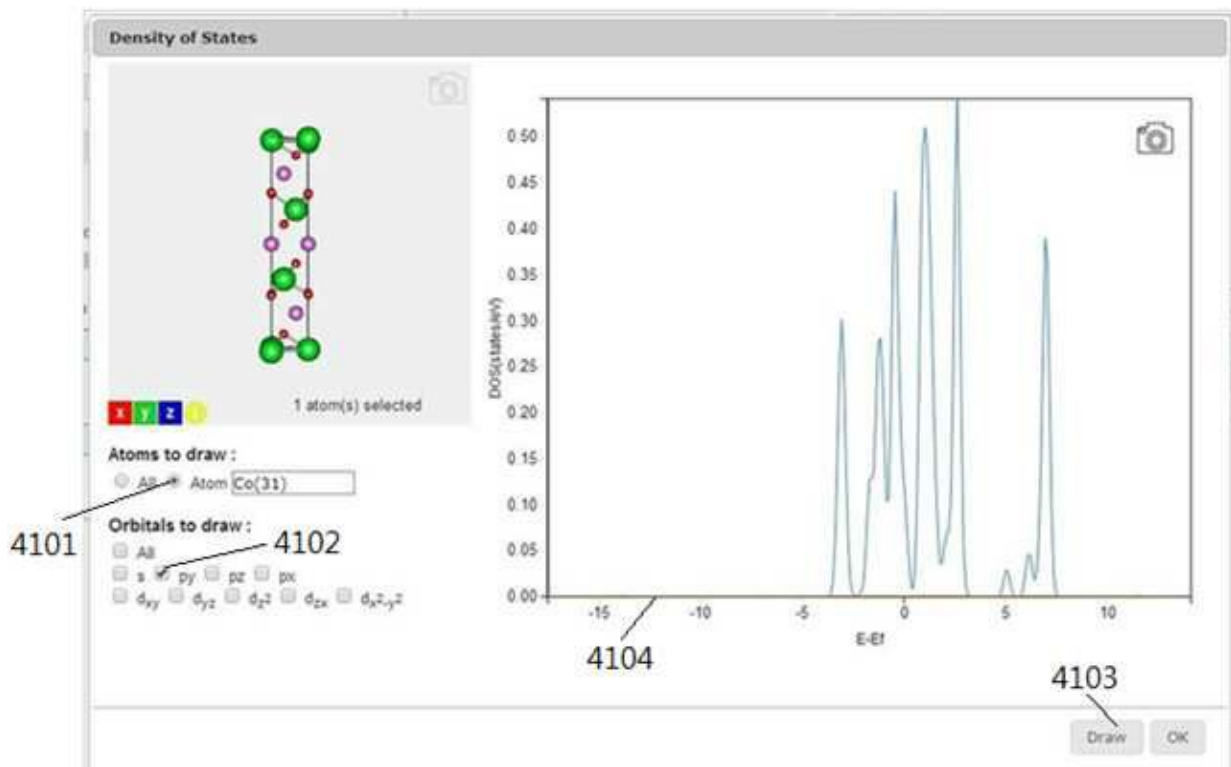
도면39



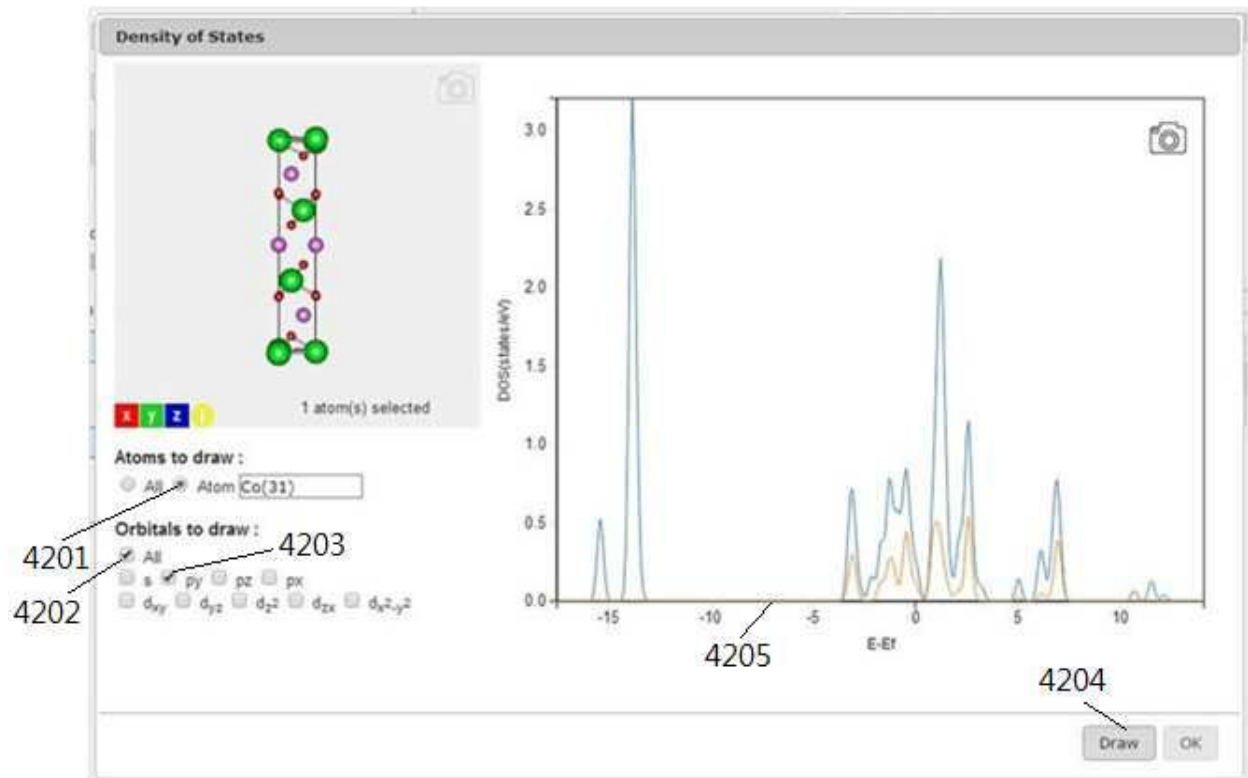
도면40



도면41



도면42



도면43

