



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0072304
(43) 공개일자 2020년06월22일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G16C 10/00 (2019.01)

(52) CPC특허분류
G16C 20/10 (2019.02)
G16C 20/30 (2019.02)

(21) 출원번호 10-2018-0160336
(22) 출원일자 2018년12월12일
심사청구일자 2018년12월12일

(71) 출원인
한국과학기술연구원
서울특별시 성북구 화랑로14길 5 (하월곡동)

(72) 발명자
김승철
서울특별시 성북구 화랑로14길 5(하월곡동)
한상수
서울특별시 성북구 화랑로14길 5(하월곡동)
(뒷면에 계속)

(74) 대리인
리앤목특허법인

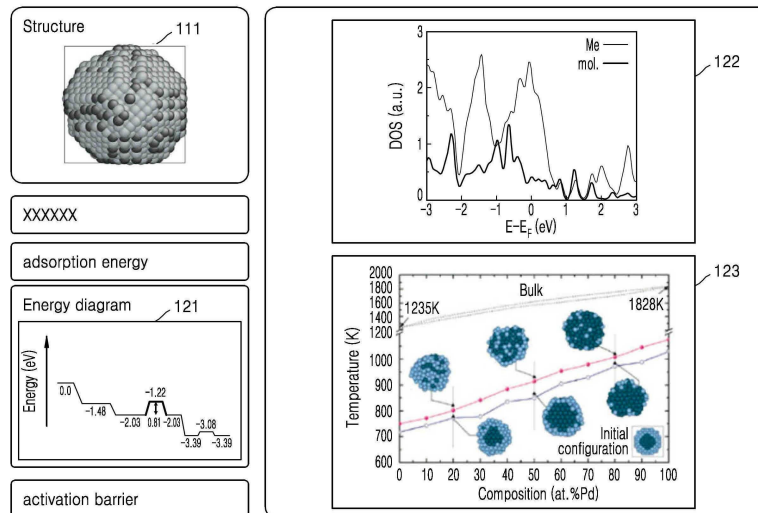
전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 발명의 명칭 화학적 촉매를 전산 모사하는 장치 및 전산 모사하는 방법

(57) 요약

촉매를 전산 모사하는 전자 장치 및 이를 이용하여, 촉매를 전산 모사하는 방법을 개시한다. 상기 방법은, 촉매로 전산 모사할 제1 물질에 관련된 제1 정보를 수신하는 단계, 상기 수신된 제1 정보에 기초하여 상기 제1 물질의 원자 구조를 모델링 하는 단계, 상기 제1 물질이 촉매로 작용할 화학 반응에 관련된 제2 정보를 수신하는 단계, 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 화학 반응에 대한 상기 제1 물질의 활성도를 산출 하는 단계, 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 화학 반응에 대한 상기 제1 물질의 안정도를 산출 하는 단계 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조, 상기 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 상기 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이하는 단계를 포함할 수 있다.

대표도



(52) CPC특허분류
G16C 20/80 (2019.02)

김동훈
서울특별시 성북구 화랑로14길 5(하월곡동)

(72) 발명자
이광렬
서울특별시 성북구 화랑로14길 5(하월곡동)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

| | |
|----------|---|
| 과제고유번호 | 1711072593 |
| 부처명 | 과학기술정보통신부 |
| 연구관리전문기관 | 한국연구재단 |
| 연구사업명 | 나노·소재기술개발(R&D) |
| 연구과제명 | 태마형 웹플랫폼 개발용 나노구조 모델링 및 전산모사 기법 집적화 기술 개발 |
| 기여율 | 1/1 |
| 주관기관 | 한국과학기술연구원 |
| 연구기간 | 2018.03.01 ~ 2019.01.31 |

명세서

청구범위

청구항 1

촉매를 전산 모사하는 전자 장치를 이용하여, 촉매를 전산 모사하는 방법에 있어서,
 상기 촉매로 전산 모사할 제1 물질에 관련된 제1 정보를 수신하는 단계;
 상기 수신된 제1 정보에 기초하여 상기 제1 물질의 원자 구조를 모델링 하는 단계;
 상기 제1 물질이 촉매로 작용할 화학 반응에 관련된 제2 정보를 수신하는 단계;
 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 화학 반응에 대한 상기 제1 물질의 활성도를 산출 하는 단계;
 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 화학 반응에 대한 상기 제1 물질의 안정도를 산출 하는 단계; 및
 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조, 상기 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 상기 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이하는 단계;를 포함하는, 방법.

청구항 2

제1 항에 있어서,
 상기 디스플레이하는 단계는,
 상기 산출된 제1 물질의 활성도에 기초하여, 상기 모델링 된 제1 물질의 활성 영역을 식별하는 단계; 및
 상기 식별된 활성 영역을 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 위에 표시하는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 3

제1 항에 있어서,
 상기 제1 물질의 활성도를 산출하는 단계는,
 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 제1 물질의 활성도를 산출하기 위한 파라미터(parameter)의 값이 프리셋(preset)된 적어도 하나의 제1 전산 모사 방법을 선택하는 단계; 및
 상기 프리셋된 파라미터의 값을 이용하여 상기 제1 전산 모사 방법을 수행함으로써, 상기 제1 물질의 활성도를 산출하는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 4

제3 항에 있어서,
 상기 제1 전산 모사 방법을 선택하는 단계는,
 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 제1 물질의 활성도를 산출하는데 적합한 복수의 제1 전산 모사 방법들의 순위를 설정하는 단계; 및
 상기 설정된 순위에 기초하여, 상기 복수의 제1 전산 모사 방법들 중에서 적어도 하나의 모사 방법을 선택하는 단계;를 포함하는 방법.

청구항 5

제1 항에 있어서,

상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 단계는,

상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 제1 물질의 안정도를 계산하기 위한 파라미터(parameter)의 값이 프리셋된 제2 전산 모사 방법을 선택하는 단계; 및

상기 프리셋된 파라미터의 값을 이용하여 상기 제2 전산 모사 방법을 수행함으로써, 상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 6

제1 항에 있어서,

상기 방법은,

상기 제1 정보를 수정하는 사용자의 입력에 기초하여, 촉매로 전산 모사할 제2 물질을 모델링하는 단계;

상기 모델링 된 제2 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 제2 물질의 활성화도 및 상기 제2 물질의 안정도를 산출하는 단계; 및

상기 모델링 된 제2 물질의 원자 구조, 상기 산출된 제2 물질의 활성화도 및 상기 산출된 제2 물질의 안정도 중 적어도 하나에 관련된 데이터를 디스플레이하는 단계;를 더 포함하는 방법.

청구항 7

제1 항에 있어서,

상기 산출된 제1 물질의 활성화도에 관련된 데이터는 상기 화학 반응의 반응 경로에 관련된 데이터를 포함하고,

상기 방법은, 상기 반응 경로에 관련된 흡착물을 식별하는 단계;를 더 포함하고,

상기 제1 물질의 활성화도를 산출하는 단계는, 상기 식별된 흡착물의 흡착 에너지에 기초하여, 상기 제1 물질의 활성화도를 산출하는 단계;를 포함하고,

상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 단계는, 상기 식별된 흡착물에 기초하여 상기 제1 물질의 원자 구조의 변화를 모델링함으로써, 상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 단계;를 포함하는, 방법.

청구항 8

제7 항에 있어서,

상기 방법은, 상기 제2 정보에 포함된 외부 환경 변수를 변경하는 사용자의 입력을 수신하는 단계;

상기 외부 환경 변수에 기초하여 상기 흡착 에너지를 보정함으로써, 상기 제1 물질의 활성화도를 재산출하는 단계; 및

상기 외부 환경 변수에 기초하여, 상기 제1 물질의 원자 구조의 변화를 재모델링함으로써, 상기 제1 물질의 안정도는 재산출하는 단계;를 포함하는, 방법.

청구항 9

제7 항에 있어서,

상기 방법은, 상기 반응 경로에 포함된 제1 반응 단계를 선택하는 사용자의 입력을 수신하는 단계;를 더 포함하

고,

상기 제1 물질의 활성도를 산출하는 단계는, 상기 제1 반응 단계의 에너지에 기초하여, 상기 제1 물질의 활성도를 산출하는 단계;를 포함하고,

상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 단계는, 상기 제1 반응 단계에 대응하는 흡착물이 흡착된 제1 물질의 원자 구조를 모델링함으로써, 상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 단계;를 포함하는, 방법.

청구항 10

제1 항에 있어서,

상기 방법은,

상기 산출된 제1 물질의 안정도에 기초하여 상기 제1 정보를 수정하는 단계;

상기 수정된 제1 정보에 기초하여 제2 물질을 모델링 하는 단계;

상기 모델링 된 제2 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 제2 물질의 활성도 및 상기 제2 물질의 안정도를 재산출하는 단계; 및

상기 모델링 된 제2 물질의 원자 구조, 상기 산출된 제2 물질의 활성도 및 상기 산출된 제2 물질의 안정도 중 적어도 하나에 관련된 데이터를 디스플레이하는 단계;를 더 포함하는 방법.

청구항 11

촉매를 전산 모사하는 전자장치에 있어서,

상기 촉매로 전산 모사할 제1 물질에 관련된 제1 정보 및 상기 제1 물질이 촉매로 작용할 화학 반응에 관련된 제2 정보를 수신하는 사용자 입력부;

상기 수신된 제1 정보에 기초하여 상기 제1 물질의 원자 구조를 모델링하고, 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 화학 반응에 대한 상기 제1 물질의 활성도를 산출하며, 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 화학 반응에 대한 상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 프로세서; 및

상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조, 상기 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 상기 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이하는 디스플레이부를 포함하는, 전자장치.

청구항 12

컴퓨터로 읽을 수 있는 기록 매체를 포함하는 컴퓨터 프로그램 제품에 있어서, 상기 기록 매체는, 제1 항 내지 제 10항 중 어느 한 항의 방법을 컴퓨터가 수행하기 위한 명령어들이 기록된 것인, 저장 매체.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 개시는 화학적 촉매를 전산 모사하는 장치 및 상기 장치를 이용하여 전산 모사를 하는 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0003] 촉매는 활성화 에너지를 조절하기 때문에, 화학 반응을 제어하는데 빈번하게 이용된다. 하나의 화학 반응에는 여러 종류의 촉매가 이용될 수 있다. 동일한 원자로 구성된 촉매들 각각은 촉매의 원자 구조에 의해서 반응성

과 안정성의 차이가 존재한다. 따라서, 화학 반응을 제어하는 목적에 부합되는 촉매를 결정하기 위해서, 촉매를 전산 모사할 필요가 존재한다

- [0004] 종래의 촉매를 전산 모사하는 방법은 계산 기법을 중심으로 진행되었다. 각각의 기법에 대해서만 전산 모사가 별도로 진행 되었기 때문에, 전산 모사 기법들이 상호간에 유기적으로 연결되기 어려워 사용자의 불편을 초래하는 문제점이 존재하였다.
- [0005] 따라서, 종래의 계산 기법 중심의 전산 모사가 아닌, 목적 중심의 새로운 전산 모사 방법이 요구되고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

- [0007] (특허문헌 0001) 대한민국 특허청 등록특허공보 10-1675348

발명의 내용

해결하려는 과제

- [0008] 본 개시는 전산 모사 기법들이 유기적으로 연결된 목적 중심의 화학적 촉매의 전산 모사 장치 및 상기 장치를 이용한 전산 모사 방법을 제공하고자 한다.
- [0009] 개시된 실시예들이 이루고자 하는 기술적 과제는 상기된 바와 같은 기술적 과제들로 한정되지 않으며, 또 다른 기술적 과제들이 유추될 수 있다.

과제의 해결 수단

- [0011] 상술한 기술적 과제를 해결하기 위한 기술적 수단으로서, 촉매를 전산 모사하는 전자 장치를 이용하여, 촉매를 전산 모사하는 방법은 상기 촉매로 전산 모사할 제1 물질에 관련된 제1 정보를 수신하는 단계, 상기 수신된 제1 정보에 기초하여 상기 제1 물질의 원자 구조를 모델링 하는 단계, 상기 제1 물질이 촉매로 작용할 화학 반응에 관련된 제2 정보를 수신하는 단계, 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 화학 반응에 대한 상기 제1 물질의 활성도를 산출 하는 단계, 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 화학 반응에 대한 상기 제1 물질의 안정도를 산출 하는 단계 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조, 상기 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 상기 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이하는 단계를 포함할 수 있다.
- [0012] 또한, 상기 디스플레이하는 단계는, 상기 산출된 제1 물질의 활성도에 기초하여, 상기 모델링 된 제1 물질의 활성 영역을 식별하는 단계 및 상기 식별된 활성 영역을 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 위에 표시하는 단계를 포함할 수 있다.
- [0013] 또한, 상기 제1 물질의 활성도를 산출하는 단계는, 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 제1 물질의 활성도를 산출하기 위한 파라미터(parameter)의 값이 프리셋(preset)된 적어도 하나의 제1 전산 모사 방법을 선택하는 단계 및 상기 프리셋된 파라미터의 값을 이용하여 상기 제1 전산 모사 방법을 수행함으로써, 상기 제1 물질의 활성도를 산출하는 단계를 포함할 수 있다.
- [0014] 또한, 상기 제1 전산 모사 방법을 선택하는 단계는, 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 제1 물질의 활성도를 산출하는데 적합한 복수의 제1 전산 모사 방법들의 순위를 설정하는 단계 및 상기 설정된 순위에 기초하여, 상기 복수의 제1 전산 모사 방법들 중에서 적어도 하나의 모사 방법을 선택하는 단계를 포함할 수 있다.
- [0015] 또한, 상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 단계는, 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 제1 물질의 안정도를 계산하기 위한 파라미터(parameter)의 값이 프리셋된 제2 전산 모사 방법을 선택하는 단계 및 상기 프리셋된 파라미터의 값을 이용하여 상기 제2 전산 모사 방법을 수행함으로써, 상기

제1 물질의 안정도를 산출하는 단계를 포함할 수 있다.

- [0016] 또한, 상기 방법은, 상기 제1 정보를 수정하는 사용자의 입력에 기초하여, 촉매로 전산 모사할 제2 물질을 모델링하는 단계, 상기 모델링 된 제2 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 제2 물질의 활성도 및 상기 제2 물질의 안정도를 산출하는 단계 및 상기 모델링 된 제2 물질의 원자 구조, 상기 산출된 제2 물질의 활성도 및 상기 산출된 제2 물질의 안정도 중 적어도 하나에 관련된 데이터를 디스플레이하는 단계를 더 포함할 수 있다.
- [0017] 또한, 상기 산출된 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터는 상기 화학 반응의 반응 경로에 관련된 데이터를 포함하고, 상기 방법은, 상기 반응 경로에 관련된 흡착물을 식별하는 단계를 더 포함하고, 상기 제1 물질의 활성도를 산출하는 단계는, 상기 식별된 흡착물의 흡착 에너지에 기초하여, 상기 제1 물질의 활성도를 산출하는 단계를 포함하고, 상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 단계는, 상기 식별된 흡착물에 기초하여 상기 제1 물질의 원자 구조의 변화를 모델링함으로써, 상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 단계를 포함할 수 있다.
- [0018] 또한, 상기 방법은, 상기 제2 정보에 포함된 외부 환경 변수를 변경하는 사용자의 입력을 수신하는 단계, 상기 외부 환경 변수에 기초하여 상기 흡착 에너지를 보정함으로써, 상기 제1 물질의 활성도를 재산출하는 단계 및 상기 외부 환경 변수에 기초하여, 상기 제1 물질의 원자 구조의 변화를 재모델링함으로써, 상기 제1 물질의 안정도는 재산출하는 단계를 포함할 수 있다.
- [0019] 또한, 상기 방법은, 상기 반응 경로에 포함된 제1 반응 단계를 선택하는 사용자의 입력을 수신하는 단계를 더 포함하고, 상기 제1 물질의 활성도를 산출하는 단계는, 상기 제1 반응 단계의 에너지에 기초하여, 상기 제1 물질의 활성도를 산출하는 단계를 포함하고, 상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 단계는, 상기 제1 반응 단계에 대응하는 흡착물이 흡착된 제1 물질의 원자 구조를 모델링함으로써, 상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 단계를 포함할 수 있다.
- [0020] 또한, 상기 방법은, 상기 산출된 제1 물질의 안정도에 기초하여 상기 제1 정보를 수정하는 단계, 상기 수정된 제1 정보에 기초하여 제2 물질을 모델링 하는 단계, 상기 모델링 된 제2 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 제2 물질의 활성도 및 상기 제2 물질의 안정도를 재산출하는 단계 및 상기 모델링 된 제2 물질의 원자 구조, 상기 산출된 제2 물질의 활성도 및 상기 산출된 제2 물질의 안정도 중 적어도 하나에 관련된 데이터를 디스플레이하는 단계를 더 포함할 수 있다.
- [0021] 상술한 기술적 과제를 해결하기 위한 기술적 수단으로서, 촉매를 전산 모사하는 전자 장치는 상기 촉매로 전산 모사할 제1 물질에 관련된 제1 정보 및 상기 제1 물질이 촉매로 작용할 화학 반응에 관련된 제2 정보를 수신하는 사용자 입력부, 상기 수신된 제1 정보에 기초하여 상기 제1 물질의 원자 구조를 모델링하고, 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 화학 반응에 대한 상기 제1 물질의 활성도를 산출하며, 상기 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 상기 화학 반응에 대한 상기 제1 물질의 안정도를 산출하는 프로세서 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조, 상기 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 상기 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이하는 디스플레이부를 포함할 수 있다.
- [0022] 한편, 상술한 기술적 과제를 해결하기 위한 기술적 수단으로서, 컴퓨터에서 실행시키기 위한 프로그램을 기록한, 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체는, 전술한 촉매를 전산 모사하는 방법을 컴퓨터에서 실행시키기 위한 프로그램이 기록된 것일 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0024] 도 1은 일 실시예에 따른, 화학적 촉매를 전산 모사하는 것을 디스플레이하는 것을 나타내는 도면이다.
- 도 2는 일 실시예에 따른, 화학적 촉매를 전산 모사하는 장치를 이용하여, 화학적 촉매를 전산 모사하는 방법을 나타내는 순서도이다.
- 도 3은 일 실시예에 따른, 화학적 촉매의 원자 구조를 모델링하는 것을 디스플레이하는 것을 나타낸 것이다.
- 도 4는 일 실시예에 따른, 화학적 촉매의 활성도를 전산 모사하는 것을 디스플레이한 것을 나타낸 것이다.
- 도 5는 일 실시예에 따른, 화학적 촉매의 활성도를 전산 모사하는 것을 디스플레이한 것을 나타낸 것이다.
- 도 6은 일 실시예에 따른, 화학적 촉매의 안정도를 전산 모사하는 것을 디스플레이한 것을 나타낸 것이다.

도 7은 일 실시예에 따른, 흡착물에 의한 화학적 촉매의 활성화 및 안정도를 전산 모사하는 방법에 관한 순서도이다.

도 8은 일 실시예에 따른, 흡착물에 의한 화학적 촉매의 활성화 및 안정도를 전산 모사한 것을 디스플레이하는 것을 나타낸 것이다.

도 9는 일 실시예에 따른, 전자 장치의 블록도이다.

도 10은 일 실시예에 따른, 서버의 블록도이다

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0025] 아래에서는 첨부한 도면을 참조하여 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자가 용이하게 실시할 수 있도록 본 발명의 실시예를 상세히 설명한다. 그러나 본 발명은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며 여기에서 설명하는 실시예에 한정되지 않는다. 그리고 도면에서 본 발명을 명확하게 설명하기 위해서 설명과 관계없는 부분은 생략하였으며, 명세서 전체를 통하여 유사한 부분에 대해서는 유사한 도면 부호를 붙였다.
- [0026] 본 개시의 일부 실시예는 기능적인 블록 구성들 및 다양한 처리 단계들로 나타내어질 수 있다. 이러한 기능 블록들의 일부 또는 전부는, 특정 기능들을 실행하는 다양한 개수의 하드웨어 및/또는 소프트웨어 구성들로 구현될 수 있다. 예를 들어, 본 개시의 기능 블록들은 하나 이상의 마이크로프로세서들에 의해 구현되거나, 소정의 기능을 위한 회로 구성들에 의해 구현될 수 있다. 또한, 예를 들어, 본 개시의 기능 블록들은 다양한 프로그래밍 또는 스크립팅 언어로 구현될 수 있다. 기능 블록들은 하나 이상의 프로세서들에서 실행되는 알고리즘으로 구현될 수 있다. 또한, 본 개시는 전자적인 환경 설정, 신호 처리, 및/또는 데이터 처리 등을 위하여 종래 기술을 채용할 수 있다. “매커니즘”, “요소”, “수단” 및 “구성” 등과 같은 용어는 넓게 사용될 수 있으며, 기계적이고 물리적인 구성들로서 한정되는 것은 아니다.
- [0027] 명세서 전체에서, 어떤 부분이 다른 부분과 "연결"되어 있다고 할 때, 이는 "직접적으로 연결"되어 있는 경우뿐 아니라, 그 중간에 다른 소자를 사이에 두고 "전기적으로 연결"되어 있는 경우도 포함한다. 또한 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함"한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.
- [0028] 또한, 도면에 도시된 구성 요소들 간의 연결 선 또는 연결 부재들은 기능적인 연결 및/또는 물리적 또는 회로적 연결들을 예시적으로 나타낸 것일 뿐이다. 실제 장치에서는 대체 가능하거나 추가된 다양한 기능적인 연결, 물리적인 연결, 또는 회로 연결들에 의해 구성 요소들 간의 연결이 나타내어질 수 있다.
- [0029] 또한, 본 명세서에서 사용되는 “제 1” 또는 “제 2” 등과 같이 서수를 포함하는 용어는 다양한 구성 요소들을 설명하는데 사용할 수 있지만, 상기 구성 요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성 요소를 다른 구성 요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다.
- [0031] 이하 첨부된 도면을 참고하여 본 발명을 상세히 설명하기로 한다.
- [0033] 도 1은 일 실시예에 따른, 전자 장치가 화학적 촉매를 전산 모사하는 것을 디스플레이하는 것을 나타내는 도면이다.
- [0034] 일 실시예에 따르면, 전자 장치(10)는 화학적 촉매로 이용될 제1 물질을 전산 모사할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 제1 물질의 원자 구조를 모델링할 수 있다. 또한, 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 활성도를 산출할 수 있다. 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 안정도를 산출할 수 있다.
- [0035] 일 실시예에 따르면, 전자 장치(10)는 서버(20)로 제1 물질에 관련된 제1 정보를 전송할 수 있다. 서버(20)는 수신된 제1 정보에 기초하여 제1 물질을 전산 모사할 수 있다. 예를 들면, 서버(20)는 제1 물질의 원자 구조를 모델링할 수 있다. 또한, 서버(20)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 활성도를 산출할 수 있다. 서버(20)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 안정도를 산출할 수 있다. 서버(20)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 관련된 데이터, 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 전자 장치(10)로 전송할 수 있다.

- [0036] 도 1을 참조하면, 전자 장치(10)는 제1 물질을 전산 모사한 것을 디스플레이 할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 디스플레이부(12-1)의 적어도 일부 영역에 모델링 된 제1 물질에 관련된 데이터, 산출된 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이 할 수 있다.
- [0037] 구체적인 예를 들면, 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 관련된 데이터를 디스플레이부(12-1)의 제1 영역(111)에 디스플레이 할 수 있다. 또한, 전자 장치(10)는 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터(예를 들면, 화학 반응의 에너지 다이어그램에 관련된 데이터, 제1 물질의 상태 밀도 함수에 관련된 데이터)를 디스플레이부(12-1)의 제2 영역(121) 및 제3 영역(122) 중 적어도 하나에 디스플레이 할 수 있다. 또한, 전자 장치(10)는 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터를 전자장치(10)의 디스플레이부(12-1)의 제3 영역(122) 및 제4 영역(123) 중 적어도 하나에 디스플레이 할 수 있다.
- [0038] 제1 영역 내지 제4 영역은 디스플레이부(12-1)의 일부 영역임을 나타내는 것이고, 특정 영역을 나타내는 것이 아니다. 제1 영역(120) 내지 제4 영역(123)은 상호간에 적어도 일부가 동일한 영역일 수 있다. 즉, 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질에 관련된 데이터, 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 UI에 기초하여 디스플레이부(12-1)의 임의의 영역에 디스플레이 할 수 있다.
- [0040] 도 2는 일 실시예에 따른, 화학적 촉매를 전산 모사하는 장치를 이용하여, 화학적 촉매를 전산 모사하는 방법을 나타내는 순서도이다.
- [0041] 단계 S210을 참조하면, 전자 장치(10)는 사용자 입력부(11)를 이용하여 촉매로 전산 모사할 제1 물질에 관련된 제1 정보를 수신할 수 있다.
- [0042] 제1 정보는 제1 물질의 원자의 종류, 제1 물질의 조성, 제1 물질의 크기에 관한 정보를 포함할 수 있으나 이에 제한되지 않는다.
- [0043] 제1 물질의 조성에 관한 정보는 제1 물질의 결정 구조(crystal structure), 제1 물질의 덩어리 구조(bulk structure), 제1 물질의 표면 구조(surface structure), 제1 물질의 입자 구조(particle structure), 제1 물질의 형상(예를 들면, 구형, 막대형 등) 및 제1 물질의 담지체 구조(support structure)에 관한 정보를 포함할 수 있다.
- [0044] 전자 장치(10)는 사용자 입력부(11)를 통해서 사용자로부터 제1 정보에 관련된 데이터를 수신할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 제1 물질의 원자를 선택하는 사용자의 입력, 제1 물질의 크기를 입력하는 사용자의 입력 및 제1 물질의 조성에 관련된 사용자의 입력을 수신할 수 있다.
- [0045] 전자 장치(10)는 제1 물질을 모델링 하는데 필요한 속성을 사용자 입력부(11)를 통해서 수신할 수 있다. 또한, 전자 장치(10)는 제1 물질의 표면 인덱스를 지정하는 사용자의 입력을 사용자 입력부(11)를 통해서 수신할 수 있다.
- [0046] 전자 장치(10)는 메모리(17)에 저장된 제1 정보에 관련된 데이터를 불러오기(load)하기 위해 전자 장치(10)를 제어하는 사용자 입력을 사용자 입력부(11)를 통해서 수신할 수 있다. 또는, 전자 장치(10)는 서버(20)의 DB(27)에 저장된 제1 정보에 관련된 데이터를 불러오기하기 위해 전자 장치(10)를 제어하는 사용자 입력을 사용자 입력부(11)를 통해서 수신할 수 있다. 메모리(17) 또는 DB(27)에 저장된 제1 정보는 기존에 사용자에게 의해서 저장된 제1 물질의 제1 정보일 수 있다. 또는, 메모리(17) 또는 DB(27)에 저장된 제1 정보는 프리셋(preset)된 제1 물질의 제1 정보일 수 있다.
- [0047] 단계 S220을 참조하면, 전자 장치(10)는 제1 정보에 기초하여 상기 제1 물질의 원자 구조를 모델링할 수 있다.
- [0048] 전자 장치(10)는 제1 물질의 원자 구조를 모델링하는 모델링 소프트웨어를 선택하고, 제1 정보를 모델링 소프트웨어에 입력함으로써 제1 물질의 원자 구조를 모델링할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 Coordination number(CN), Radial distribution function(RDF), Short range ordering(SRO)에 관련된 데이터가 생성되도록 제1 물질의 원자 구조를 모델링할 수 있다.
- [0049] 전자 장치(10)는 제1 정보에 기초하여 복수의 모델링 소프트웨어들 중에서 적합한 순위를 설정하고, 설정된 순위에 기초하여 적어도 하나의 모델링 소프트웨어를 선택할 수 있다.
- [0050] 전자 장치(10)는 제1 정보에 기초하여 모델링 소프트웨어를 사용자에게 제안할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 모델링 소프트웨어의 목록을 디스플레이하고, 사용자로부터 적어도 하나의 모델링 소프트웨어를 선택하

는 입력을 수신할 수 있다. 전자 장치(10)는 선택된 모델링 소프트웨어를 이용하여 제1 물질의 원자 구조를 모델링할 수 있다.

- [0051] 단계 S230을 참조하면, 전자 장치(10)는 제1 물질이 촉매로 작용할 화학 반응에 관련된 제2 정보를 수신할 수 있다.
- [0052] 제2 정보는 화학 반응의 반응물, 생성물, 반응 경로 및 중간 생성물에 관련된 정보를 포함할 수 있다. 제2 정보는 온도, pH, 용매, 외부 인가 전압과 같은 화학 반응의 외부 환경 변수에 관련된 정보를 포함할 수 있다.
- [0053] 전자 장치(10)는 사용자 입력부(11)를 통해서 사용자로부터 제2 정보에 관련된 데이터를 수신할 수 있다.
- [0054] 전자 장치(10)는 사용자 입력부(11)를 통해서 메모리(17)에 저장된 제2 정보에 관련된 데이터를 불러오기(load)하기 위해 전자 장치(10)를 제어하는 사용자 입력을 사용자 입력부(11)를 통해서 수신할 수 있다. 또는, 전자 장치(10)는 서버(20)의 DB(27)에 저장된 제2 정보에 관련된 데이터를 불러오기(load)하기 위해 전자 장치(10)를 제어하는 사용자 입력을 사용자 입력부(11)를 통해서 수신할 수 있다. 메모리(17) 또는 DB(27)에 저장된 제2 정보는 기존에 작업되어 저장된 제2 정보일 수 있다. 또는, 메모리(17) 또는 DB(27)에 저장된 제2 정보는 프리셋(preset)된 제2 정보일 수 있다.
- [0055] 단계 S240을 참조하면, 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 화학 반응에 대한 상기 제1 물질의 활성도를 산출할 수 있다.
- [0056] 전자 장치(10)는 제1 물질의 활성도를 산출하는 소프트웨어를 선택할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 물질의 원자 구조의 활성 영역을 산출하는 소프트웨어, 제1 물질의 활성도와 관련된 물리적 특성/ 화학적 특성을 산출하는 소프트웨어를 선택할 수 있다.
- [0057] 제1 물질의 활성도를 산출하는 소프트웨어는 화학 반응의 각 단계의 열역학적 에너지를 산출하는 소프트웨어, 화학 반응의 에너지 다이어그램을 산출하는 소프트웨어, 화학 반응의 중간 생성물을 모델링하는 소프트웨어, 화학 반응에 관여하는 흡착물의 흡착 에너지를 산출하는 소프트웨어, 화학 반응에 관련된 물질의 전자 구조(예를 들면, local/global d-band center, DOS)를 산출하는 소프트웨어를 포함할 수 있다.
- [0058] 예를 들면, 화학 반응에 관련된 물질의 전자 구조를 산출하는 소프트웨어는 제1 물질의 local/global d-band center를 산출하는 소프트웨어, local potential map을 산출하는 소프트웨어 및 상태 밀도 함수(Density of State, DOS)를 산출하는 소프트웨어를 포함할 수 있다. 또한, 흡착물의 흡착 에너지를 산출하는 소프트웨어는 밀도범함수이론(Density Functional Theory, DFT)이나 양자화학적(Quantum Chemistry) 계산법을 수행하는 소프트웨어, High throughput을 산출하는 소프트웨어를 포함할 수 있다. 또한, 화학 반응의 각 단계별 에너지를 계산하는 소프트웨어는 NEB(Nudged elastic band method)를 수행하는 소프트웨어, meta-dynamics를 산출하는 소프트웨어, 회귀식을 이용하는 소프트웨어를 포함할 수 있다.
- [0059] 전자 장치(10)는 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 활성도를 산출하는데 적합한 소프트웨어를 선택할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 반응물 및 생성물에 관련된 제2 정보와 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 화학 반응의 에너지 다이어그램을 산출하는 소프트웨어, 화학 반응에 관련된 흡착물의 흡착 에너지를 산출하는 소프트웨어 및 흡착 에너지에 의해서 제1 물질의 피독성을 산출하는 소프트웨어를 선택할 수 있다.
- [0060] 전자 장치(10)는 제1 물질의 활성도를 산출하는 소프트웨어들의 순위를 설정할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 화학 반응의 에너지 다이어그램을 산출하는 제1 소프트웨어, 흡착 에너지를 산출하는 제2 소프트웨어 및 제1 물질의 피독성을 산출하는 제3 소프트웨어 중에서 제2 소프트웨어를 1순위로, 제3 소프트웨어를 2순위로, 제1 소프트웨어를 3순위로 설정할 수 있다.
- [0061] 전자 장치(10)는 설정된 순위에 기초하여 제1 물질의 활성도를 산출하는 소프트웨어를 실행함으로써, 제1 물질의 활성도를 산출할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 제1 소프트웨어를 실행함으로써, 화학 반응의 흡착 에너지를 산출할 수 있다. 전자 장치(10)는 산출된 흡착 에너지에 관련된 데이터를 제3 소프트웨어에 입력하여 실행함으로써, 제1 물질의 피독성을 산출할 수 있다. 전자 장치(10)는 흡착 에너지 및 제1 물질의 피독성을 제1 소프트웨어에 입력하여 실행함으로써, 화학 반응의 에너지 다이어그램을 산출할 수 있다.
- [0062] 전자 장치(10)는 제1 물질의 활성도를 산출하기 위한 소프트웨어의 파라미터(parameter) 값을 프리셋(preset)하여 사용자에게 제공할 수 있다. 제1 물질의 활성도를 산출하는 소프트웨어들은 알고리즘에 따라서 다른 파라미터를 이용할 수 있다. 또한, 화학 반응 및 촉매의 종류에 따라서, 활성도를 정확하게 산출하는 파라미터가 존

재한다. 전자 장치(10)는 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여 제1 물질의 활성도를 정확하게 산출하기 위한 파라미터 값을 프리셋하여 사용자에게 제공할 수 있다. 전자 장치(10)는 프리셋된 파라미터 값을 이용하여 제1 물질의 활성도를 산출할 수 있다.

- [0063] 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여 제1 물질의 활성 영역을 식별할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 반응 단계에 대응하는 제1 물질의 원자 구조 및 제1 물질에 흡착된 흡착물을 모델링함으로써, 제1 물질의 활성 영역을 식별할 수 있다. 다른 예를 들면, 전자 장치(10)는 제1 물질의 상태 밀도 함수 및 흡착물의 상태 밀도 함수를 이용하여 흡착물이 흡착된 제1 물질의 활성 영역을 식별할 수 있다.
- [0064] 단계 S250을 참조하면, 전자 장치(10)는 제2 정보 및 상기 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 화학 반응에 대한 제1 물질의 안정도를 산출할 수 있다.
- [0065] 전자 장치(10)는 제1 물질의 안정도를 산출하는 소프트웨어를 선택할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 입자 및 표면의 열적 안정성, 화학적 안정성 및 기계적 안정도를 산출하는 소프트웨어를 선택할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 물질의 입자 및 표면의 내구성을 시험하는 소프트웨어를 선택할 수 있다.
- [0066] 제1 물질의 안정도를 산출하는 소프트웨어는 화학 반응에 관련된 흡착물의 흡착 에너지를 산출하는 소프트웨어, 흡착 에너지에 의해서 제1 물질의 피독성을 산출하는 소프트웨어, Paubaix diagram를 산출하는 소프트웨어, dissolution potential를 산출하는 소프트웨어, 분자동력학을 실행하는 소프트웨어, 몬테카를로 기법을 실행하는 소프트웨어를 포함할 수 있다.
- [0067] 전자 장치(10)는 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 안정도를 산출하는데 적합한 소프트웨어를 선택할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 pH, 온도, 압력, 외부 인가 전압에 관련된 제2 정보와 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 평균 응력, 위치에 따른 응력을 산출하는 분자동력학을 실행하는 소프트웨어를 선택할 수 있다. 다른 예를 들면, 전자 장치(10)는 반응물 및 생성물, 온도, 압력에 관련된 제2 정보와 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 피독성을 산출하는 소프트웨어를 선택할 수 있다.
- [0068] 전자 장치(10)는 제1 물질의 안정도를 산출하기 위한 소프트웨어의 파라미터(parameter) 값을 프리셋(preset)하여 사용자에게 제공할 수 있다. 제1 물질의 안정도를 산출하는 소프트웨어들은 알고리즘에 따라서 다른 파라미터를 이용할 수 있다. 또한, 화학 반응 및 촉매의 종류에 따라서, 안정도를 정확하게 산출하는 파라미터가 존재한다. 전자 장치(10)는 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여 제1 물질의 안정도를 정확하게 산출하기 위한 파라미터 값을 프리셋하여 사용자에게 제공할 수 있다. 전자 장치(10)는 프리셋된 파라미터 값을 이용하여 제1 물질의 안정도를 산출할 수 있다.
- [0069] 단계 S260을 참조하면, 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조, 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이 할 수 있다.
- [0070] 전자 장치(10)는 디스플레이부(12-1)의 적어도 일부 영역에 모델링 된 제1 물질의 원자 구조, 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이하기 위한 사용자 인터페이스를 제공할 수 있다. 전자 장치(10)는 디스플레이된 디스플레이부(12-1)의 적어도 일부 영역에 모델링 된 제1 물질의 원자 구조, 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 제거하는 사용자 인터페이스를 제공할 수 있다.
- [0071] 전자 장치(10)는 전산 모사 결과들을 비교할 수 있는 사용자 인터페이스를 제공할 수 있다.
- [0072] 예를 들면, 전자 장치(10)는 복수의 물질에 대한 전산 모사 결과를 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조와 제2 물질의 원자 구조, 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터와 제2 물질의 활성도에 관련된 데이터, 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터와 제2 물질의 안정도에 관련된 데이터를 디스플레이부(12-1)의 적어도 일부 영역에 디스플레이 할 수 있다. 제1 물질과 제2 물질은 원자의 종류, 조성 및 크기와 같은 제1 정보가 다른 물질일 수 있다.
- [0073] 다른 예를 들면, 전자 장치(10)는 제2 정보가 다른 복수의 화학 반응에 대한 전산 모사 결과를 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 온도, pH, 용매, 외부 인가 전압과 같은 외부 환경 변수가 다른 화학 반응들에 대해서 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터를 디스플레이부(12-1)의 적어도 일부 영역에 디스플레이 할 수 있다.

- [0074] 사용자는 전산 모사할 물질에 관한 정보, 화학 반응에 관한 정보에 기초하여, 물질의 활성화도 및 안정도를 산출하기 위한 소프트웨어를 용이하게 선택하고, 파라미터를 용이하게 설정할 수 있다. 따라서, 사용자는 데이터가 유기적으로 연결된 소프트웨어들을 이용하여 물질을 용이하게 전산 모사할 수 있다. 또한, 사용자는 전산 모사 결과들을 용이하게 비교할 수 있다.
- [0076] 도 3은 일 실시예에 따른, 화학적 촉매의 원자 구조를 모델링하는 것을 디스플레이하는 것을 나타낸 것이다.
- [0077] 도 3을 참조하면, 전자 장치(10)는 제1 물질의 원자 구조를 모델링한 데이터를 디스플레이부(12-1)의 적어도 일부 영역에 디스플레이 할 수 있다.
- [0078] 전자 장치(10)는 사용자로부터 제1 정보를 수신하기 위한 사용자 인터페이스를 제공할 수 있다. 전자 장치(10)는 사용자로부터 제1 물질의 원자의 종류, 제1 물질의 조성, 제1 물질의 크기에 관한 정보를 수신하기 위한 입력창을 디스플레이부(12-1)의 일부 영역에 디스플레이 할 수 있다.
- [0079] 예를 들면, 전자 장치(10)는 제1 물질의 표면 구조에 관련된 사용자 입력을 수신하는 입력창(310)을 디스플레이 할 수 있다.
- [0080] 다른 예를 들면, 전자 장치(10)는 제1 물질의 입자 구조에 관련된 사용자 입력을 수신하는 입력창(320)을 디스플레이 할 수 있다. 구체적으로, 전자 장치(10)는 제1 물질의 입자 크기를 수신하는 입력창(325)을 디스플레이 할 수 있다.
- [0081] 다른 예를 들면, 전자 장치(10)는 메모리(17) 또는 DB(27)에 저장된 원자 구조에 관련된 데이터를 불러오기 하기 위한 사용자 입력을 수신하는 입력창(321, 323)을 디스플레이 할 수 있다.
- [0082] 다른 예를 들면, 전자 장치(10)는 제1 물질의 담지체에 관련된 사용자 입력을 수신하기 위한 입력창(330)을 디스플레이 할 수 있다.
- [0083] 전자 장치(10)는 제1 정보에 기초하여 제1 물질의 원자 구조를 모델링할 수 있다. 또는, 전자 장치(10)는 제1 정보를 서버(20)로 송신하고, 서버(20)로부터 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 관련된 데이터를 수신할 수 있다.
- [0084] 전자 장치(10)는 제1 정보에 기초하여, 제1 물질의 원자 구조를 모델링하는 소프트웨어를 선택할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 정보에 기초하여 복수의 소프트웨어들의 순위를 설정할 수 있다. 전자 장치(10)는 설정된 순위에 기초하여 소프트웨어를 선택할 수 있다. 전자 장치(10)는 설정된 순위에 기초하여, 복수의 소프트웨어 목록을 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 소프트웨어 목록에서 적어도 하나의 소프트웨어를 선택하는 사용자의 입력을 수신할 수 있다. 전자 장치(10)는 선택된 소프트웨어를 이용하여 제1 물질의 원자 구조를 모델링 할 수 있다.
- [0085] 전자 장치(10)는 선택된 소프트웨어의 파라미터(parameter) 값을 프리셋(preset)하여 사용자에게 제공할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 정보 및 선택된 소프트웨어의 프리셋된 파라미터에 기초하여 제1 물질의 원자 구조를 모델링 할 수 있다.
- [0086] 전자 장치(10)는 제1 정보에 기초하여 모델링 된 제1 물질의 원자 구조를 디스플레이부의 적어도 일부 영역에 디스플레이 할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 제1 물질의 입자 구조에 관련된 데이터를 디스플레이부(12-1)의 제2 영역(370)에 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 물질의 표면 구조에 관련된 데이터를 디스플레이부(12-1)의 제3 영역(380)에 디스플레이 할 수 있다.
- [0087] 전자 장치(10)는 사용자가 복수의 물질의 원자 구조를 비교할 수 있도록, 모델링 된 물질들의 원자 구조에 관련된 데이터를 함께 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 디스플레이된 제1 물질의 원자 구조에 관련된 데이터의 위치를 변경, 삭제하기 위한 사용자 인터페이스를 제공할 수 있다.
- [0088] 전자 장치(10)는 제1 정보를 수정하는 사용자 입력을 수신하기 위한 사용자 인터페이스를 제공할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 제1 정보를 수정하는 입력창을 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 수정된 제1 정보에 기초하여 제2 물질의 원자 구조를 모델링 할 수 있다.
- [0090] 도 4는 일 실시예에 따른, 화학적 촉매의 활성화도를 전산 모사하는 것을 디스플레이한 것을 나타낸 것이다.

- [0091] 전자 장치(10)는 사용자로부터 화학 반응에 관련된 제2 정보를 수신하기 위한 사용자 인터페이스를 제공할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 반응물, 생성물, 반응 경로 및 중간 생성물에 관련된 제2 정보를 수신하기 위한 입력창을 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 온도, pH, 용매, 외부 인가 전압과 같은 화학 반응의 외부 환경 변수에 관련된 제2 정보를 수신하기 위한 입력창을 디스플레이 할 수 있다.
- [0092] 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 및 제2 정보에 기초하여 제1 물질의 활성도를 산출할 수 있다. 또는, 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 및 제2 정보를 서버(20)로 전송하고, 서버(20)로부터 산출된 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터를 수신할 수 있다.
- [0093] 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 및 제2 정보에 기초하여 제1 물질의 활성도를 산출하기 위한 소프트웨어를 선택할 수 있다. 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 및 제2 정보에 기초하여 복수의 소프트웨어들의 순위를 설정할 수 있다. 전자 장치(10)는 설정된 순위에 기초하여 소프트웨어를 선택할 수 있다. 전자 장치(10)는 설정된 순위에 기초하여, 복수의 소프트웨어 목록을 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 소프트웨어 목록에서 적어도 하나의 소프트웨어를 선택하는 사용자의 입력을 수신할 수 있다. 전자 장치(10)는 선택된 소프트웨어를 이용하여 제1 물질의 활성도를 산출 할 수 있다.
- [0094] 전자 장치(10)는 선택된 소프트웨어의 파라미터(parameter) 값을 프리셋(preset)하여 사용자에게 제공할 수 있다. 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조, 제2 정보 및 선택된 소프트웨어의 프리셋된 파라미터에 기초하여 제1 물질의 활성도를 산출 할 수 있다.
- [0095] 도 4를 참조하면, 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 및 제2 정보에 기초하여 산출된 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터를 디스플레이부(12-1)의 적어도 일부에 디스플레이 할 수 있다.
- [0096] 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터는 화학 반응의 흡착 에너지에 관련된 데이터, 화학 반응의 각 단계의 열역학적 에너지에 관련된 데이터, 화학 반응의 에너지 다이어그램에 관련된 데이터, 화학 반응의 중간 생성물에 관련된 데이터, 및 제1 물질의 전자 구조에 관련된 데이터를 포함할 수 있다.
- [0097] 전자 장치(10)는 디스플레이부(12-1)의 제1 영역(410)에 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 관련된 데이터를 디스플레이하고, 디스플레이부(12-1)의 제2 영역(420)에 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터를 디스플레이 할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 디스플레이부(12-1)의 제2 영역(420)에 제1 물질의 상태 밀도 함수 및 흡착물의 상태 밀도 함수를 디스플레이 할 수 있다. 사용자는 제1 물질의 상태 밀도 함수 및 흡착물의 상태 밀도 함수로부터 흡착물의 흡착 에너지 및 제1 물질의 피독성을 확인할 수 있다.
- [0099] 도 5는 일 실시예에 따른, 화학적 촉매의 활성도를 전산 모사하는 것을 디스플레이한 것을 나타낸 것이다.
- [0100] 도 5를 참조하면, 전자 장치(10)는 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터들을 함께 디스플레이 할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 복수의 반응 단계가 포함된 화학 반응의 반응 경로 및 반응 단계들 각각에 대응하는 활성화 에너지에 관련된 데이터 및 중간 생성물을 모델링한 데이터를 함께 디스플레이 할 수 있다. 또한, 전자 장치(10)는 반응 단계에 대한 흡착 에너지에 관련된 데이터 및 제1 물질의 피독성에 관련된 데이터를 함께 디스플레이 할 수 있다.
- [0101] 전자 장치(10)는 제2 영역(520)에 디스플레이된 반응 경로에 포함된 반응 단계(521)를 선택하는 사용자 인터페이스를 제공할 수 있다. 전자 장치(10)는 선택된 반응 단계(521)에 대응하는 활성화 에너지에 관련된 데이터를 제3 영역(523)에 디스플레이할 수 있다. 전자 장치(10)는 선택된 반응 단계(521)에 대응하는 중간 생성물을 모델링하여 제4 영역(525)에 디스플레이 할 수 있다.
- [0102] 전자 장치(10)는 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 활성 영역을 식별할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 물질의 활성 영역(511)을 제1 영역(510)에 디스플레이된 제1 물질의 원자 구조에 관련된 데이터 상에 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 사용자가 선택된 반응 단계(521)에 대응하는 제1 물질의 활성 영역(511)을 식별하고, 제1 물질의 활성 영역(511)을 제1 물질의 원자 구조에 관련된 데이터 상에 디스플레이 할 수 있다.
- [0103] 전자 장치(10)는 제2 정보를 수정하는 사용자 입력을 수신하기 위한 사용자 인터페이스를 제공할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 pH, 온도, 외부 인가 전압과 같은 제2 정보를 수정하기 위한 사용자 입력을 수신하는 입력창(530)을 디스플레이 할 수 있다.

- [0104] 전자 장치(10)는 수정된 제2 정보에 기초하여 제1 물질의 활성도를 재산출하고, 재산출된 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터를 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 수정되기 전의 제2 정보에 기초하여 산출된 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 수정된 제2 정보에 기초하여 산출된 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이 할 수 있다.
- [0105] 전자 장치(10)는 제1 정보를 수정한 사용자의 입력에 기초하여, 제2 물질의 원자 구조를 모델링 할 수 있다. 전자 장치(10)는 모델링 된 제2 물질의 원자 구조에 기초하여 제2 물질의 활성도를 산출할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 제2 물질의 활성도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이 할 수 있다.
- [0107] 도 6은 일 실시예에 따른, 화학적 촉매의 안정도를 전산 모사하는 것을 디스플레이한 것을 나타낸 것이다.
- [0108] 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 및 제2 정보에 기초하여 제1 물질의 안정도를 산출할 수 있다. 또는, 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 및 제2 정보를 서버(20)로 전송하고, 서버(20)로부터 산출된 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터를 수신할 수 있다.
- [0109] 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 및 제2 정보에 기초하여 제1 물질의 안정도를 산출하기 위한 소프트웨어를 선택할 수 있다. 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 및 제2 정보에 기초하여 복수의 소프트웨어들의 순위를 설정할 수 있다. 전자 장치(10)는 설정된 순위에 기초하여 소프트웨어를 선택할 수 있다. 전자 장치(10)는 설정된 순위에 기초하여, 복수의 소프트웨어 목록을 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 소프트웨어 목록에서 적어도 하나의 소프트웨어를 선택하는 사용자의 입력을 수신할 수 있다. 전자 장치(10)는 선택된 소프트웨어를 이용하여 제1 물질의 안정도를 산출 할 수 있다.
- [0110] 전자 장치(10)는 선택된 소프트웨어의 파라미터(parameter) 값을 프리셋(preset)하여 사용자에게 제공할 수 있다. 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조, 제2 정보 및 선택된 소프트웨어의 프리셋된 파라미터에 기초하여 제1 물질의 안정도를 산출 할 수 있다.
- [0111] 도 6을 참조하면, 전자 장치(10)는 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 및 제2 정보에 기초하여 산출된 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터를 디스플레이부(12-1)의 적어도 일부에 디스플레이 할 수 있다.
- [0112] 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터는 제1 물질의 입자 및 표면의 열적 안정성, 화학적 안정성, 기계적 안정성에 관련된 데이터를 포함할 수 있다. 또한, 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터는 제1 물질의 입자 및 표면의 내구성에 관련된 데이터를 포함할 수 있다.
- [0113] 전자 장치(10)는 디스플레이부(12-1)의 제1 영역(610)에 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 관련된 데이터를 디스플레이하고, 디스플레이부(12-1)의 제2 영역(621)에 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터를 디스플레이 할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 산출된 제1 물질의 평균 응력 및 위치에 따른 응력에 관련된 데이터를 디스플레이 할 수 있다. 다른 예를 들면, 전자 장치(10)는 중간 생성물에 의한 제1 물질의 손상 가능성에 관련된 데이터를 디스플레이 할 수 있다. 다른 예를 들면, 전자 장치(10)는 흡착물에 의한 제1 물질의 피독성에 관련된 데이터를 디스플레이 할 수 있다.
- [0114] 도 6을 참조하면, 전자 장치(10)는 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터들을 함께 디스플레이 할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 온도와 시간에 따른 제1 물질의 열적 안정도에 관련된 데이터를 디스플레이부(12-1)의 제2 영역(621)에 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 흡착물에 의한 제1 물질의 피독성에 관련된 데이터를 디스플레이부(12-1)의 제3 영역(623)에 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 물질의 위치에 따른 제1 물질의 화학적 안정성에 관련된 데이터를 디스플레이부(12-1)의 제4 영역(625)에 디스플레이 할 수 있다.
- [0115] 전자 장치(10)는 제2 정보를 수정하는 사용자 입력을 수신하기 위한 사용자 인터페이스를 제공할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 pH, 온도, 외부 인가 전압과 같은 제2 정보를 수정하기 위한 사용자 입력을 수신하는 입력창(630)을 디스플레이 할 수 있다.
- [0116] 전자 장치(10)는 수정된 제2 정보에 기초하여 제1 물질의 안정도를 재산출하고, 재산출된 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터를 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 수정되기 전의 제2 정보에 기초하여 산출된 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 및 수정된 제2 정보에 기초하여 산출된 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이 할 수 있다.

[0117] 전자 장치(10)는 제1 정보를 수정한 사용자의 입력에 기초하여, 제2 물질의 원자 구조를 모델링 할 수 있다. 전자 장치(10)는 모델링 된 제2 물질의 원자 구조에 기초하여 제2 물질의 안정도를 산출할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 및 제2 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이 할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 제1 물질의 입자의 크기에 관련된 제1 정보를 수정한 사용자의 입력에 기초하여, 제2 물질의 원자 구조를 모델링할 수 있다. 전자 장치(10)는 제2 물질의 구조에 기초하여 제2 물질의 열적 안정성, 제2 물질의 화학적 안정성을 산출하고 디스플레이 할 수 있다.

[0119] 도 7은 일 실시예에 따른, 흡착물에 의한 화학적 촉매의 활성화도 및 안정도를 전산 모사하는 방법에 관한 순서도이다.

[0120] 단계 S710을 참조하면, 전자 장치(10)는 화학 반응의 반응 경로에 관련된 흡착물을 식별할 수 있다.

[0121] 전자 장치(10)는 화학 반응의 반응물, 생성물 및 화학 반응에 따른 중간 생성물로부터 흡착물을 식별할 수 있다. 전자 장치(10)는 흡착물 목록을 생성하고, 목록에 포함된 흡착물들 중 적어도 하나의 흡착물의 흡착 에너지를 산출할 수 있다.

[0122] 단계 S730을 참조하면, 전자 장치(10)는 상기 식별된 흡착물의 흡착 에너지에 기초하여, 상기 제1 물질의 활성화도를 산출할 수 있다.

[0123] 전자 장치(10)는 흡착 에너지로부터 제1 물질의 피독성을 산출할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 물질의 피독성으로부터 제1 물질의 비활성화 가능성 및 제1 물질의 활성화도를 산출할 수 있다.

[0124] 전자 장치(10)는 pH, 온도, 압력 및 외부 인가 전압과 같은 외부 환경 변수에 기초하여, 흡착 에너지를 보정할 수 있다. 예를 들면, 전자 장치(10)는 외부 인가 전압(U)에 대해서 흡착 에너지를 수학적 1과 같이 보정할 수 있다.

수학식 1

[0125] $E = -N_e \times U$

[0126] 여기서 N_e 는 화학 반응의 반응 단계에 관여하는 전자의 개수를 의미한다.

[0127] 전자 장치(10)는 pH에 대해서, 흡착 에너지를 수학식 2와 같이 보정할 수 있다.

수학식 2

[0128] $E = -N_e \times C \times pH$

[0129] C는 비례상수이다. 전자 장치(10)는 온도 및 압력에 대해서, 흡착 에너지를 이상기체 방정식을 이용하여 수학식 3과 같이 보정할 수 있다.

수학식 3

[0130]
$$\mu_{O_2}(T, P_{O_2}) = \mu_{O_2}(T, P^0) + k_B T \ln\left(\frac{P_{O_2}}{P^0}\right)$$

[0131] 여기서, μ_{O_2} 는 산소의 흡착 에너지, T는 온도, P^0 는 표준 압력, k_B 는 볼츠만 상수를 의미한다.

[0132] 전자 장치(10)는 보정된 흡착 에너지에 기초하여 제1 물질의 활성화도를 산출할 수 있다.

- [0133] 전자 장치(10)는 반응 경로에 포함된 제1 반응 단계를 선택하는 사용자의 입력을 수신하고, 제1 반응 단계의 에너지에 기초하여 제1 물질의 활성도를 산출할 수 있다.
- [0134] 단계 S750을 참조하면, 전자 장치(10)는 식별된 흡착물에 기초하여 제1 물질의 원자 구조의 변화를 모델링함으로써, 제1 물질의 안정도를 산출할 수 있다.
- [0135] 전자 장치(10)는 반응 경로에 포함된 제1 반응 단계를 선택하는 사용자의 입력을 수신하고, 제1 반응 단계에 대응하는 흡착물이 흡착된 제1 물질의 원자 구조를 모델링함으로써, 상기 제1 물질의 안정도를 산출할 수 있다.
- [0136] 전자 장치(10)는 제1 반응 단계에 대응하는 제1 물질의 활성점이 손상된 제1 원자 구조를 모델링 할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 반응 단계 전후의 반응 단계에 대응하는 제1 물질의 제2 원자 구조를 모델링 할 수 있다. 전자 장치(10)는 모델링된 제1 물질의 원자 구조들을 비교함으로써, 제1 물질의 손상 가능성을 산출할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 원자 구조의 에너지와 제2 원자 구조의 에너지를 비교함으로써, 제1 물질의 손상 가능성을 산출할 수 있다.
- [0137] 전자 장치(10)는 온도, pH, 용매, 외부 인가 전압과 같은 외부 환경 변수를 포함하는 제2 정보를 변경하는 사용자의 입력을 수신할 수 있다. 전자 장치(10)는 변경된 제2 정보에 기초하여 제1 물질의 활성도 및 제1 물질의 안정도 중 적어도 하나를 재산출 할 수 있다. 전자 장치(10)는 변경된 제2 정보에 기초하여, 제1 반응 단계의 전후의 원자 구조의 변화를 재모델링함으로써, 제1 물질의 활성도 및 제1 물질의 안정도 중 적어도 하나를 재산출 할 수 있다.
- [0138] 전자 장치(10)는 산출된 제1 물질의 안정도에 기초하여, 제1 정보를 수정할 수 있다. 전자 장치(10)는 제2 물질의 안정도가 높아지도록 제1 정보를 수정하고, 수정된 제1 정보에 기초하여 제2 물질의 안정도를 산출 할 수 있다. 또한, 전자 장치(10)는 수정된 제1 정보에 기초하여 제2 물질의 활성도를 재산출 할 수 있다. 전자 장치(10)는 제1 정보를 수정하여 제2 물질의 활성도 및 제2 물질의 안정도를 재산출하는 과정을 반복함으로써, 제2 물질의 안정도가 가장 높은 제1 정보를 획득할 수 있다. 제1 물질과 제2 물질은 원자의 종류, 조성 및 크기와 같은 제1 정보가 다른 물질일 수 있다.
- [0139] 단계 S770을 참조하면, 전자 장치(10)는 모델링된 제1 물질의 결정 구조, 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이 할 수 있다.
- [0140] 전자 장치(10)는 외부 환경 변수를 포함하는 제2 정보를 변경하는 사용자의 입력에 대응하여, 재모델링된 제1 물질의 결정 구조, 재산출된 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이 할 수 있다.
- [0142] 도 8은 일 실시예에 따른, 흡착물에 의한 화학적 촉매의 활성도 및 안정도를 전산 모사한 것을 디스플레이하는 것을 나타낸 것이다.
- [0143] 도 8을 참조하면, 전자 장치(10)는 디스플레이부(12-1)의 제1 영역(810)에 모델링된 제1 물질의 원자 구조에 관련된 데이터를 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 디스플레이부(12-1)의 제2 영역(830)에 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터(예를 들면, 에너지 다이어그램)를 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 디스플레이부의 제3 영역(851)에 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터(예를 들면, 제1 물질의 입자 크기와 녹는점의 상관관계 그래프)를 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 디스플레이부의 제4 영역(853) 및 제5 영역(855)에 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터(예를 들면, 흡착물이 흡착된 제1 물질의 원자 구조를 모델링한 데이터)를 디스플레이 할 수 있다.
- [0144] 전자 장치(10)는 외부 환경 요인을 포함하는 제2 정보를 수정하는 사용자의 입력에 기초하여, 제1 물질의 활성도 및 제1 물질의 안정도를 재산출 할 수 있다. 전자 장치(10)는 수정되기 전의 제2 정보에 기초하여 산출된 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 수정된 제2 정보에 기초하여 산출된 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이 할 수 있다. 전자 장치(10)는 수정되기 전의 제2 정보에 기초하여 산출된 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 및 수정된 제2 정보에 기초하여 산출된 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이 할 수 있다.
- [0146] 도 9는 일 실시예에 따른, 전자 장치의 블록도이다.

- [0147] 도 9를 참조하면, 전자 장치(10)는 사용자 입력부(11), 출력부(12), 디스플레이부(12-1), 통신부(15), 메모리(17) 및 프로세서(13)를 포함할 수 있다.
- [0148] 사용자 입력부(11)는 사용자가 전자 장치(10)를 제어하기 위한 데이터를 입력하는 수단을 의미한다. 사용자 입력부(11)는 촉매로 전산 모사할 제1 물질에 관련된 제1 정보, 화학 반응에 관련된 제2 정보를 사용자로부터 수신할 수 있다. 사용자 입력부(11)는 전자 장치(10)가 제1 물질을 전산 모사하기 위한 제어 신호를 사용자로부터 수신할 수 있다. 사용자 입력부(11)는 모델링된 제1 물질의 원자 구조, 제1 물질의 활성화도 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이하기 위한 제어 신호를 사용자로부터 수신할 수 있다. 사용자 입력부는 디스플레이된 제1 물질의 원자 구조, 제1 물질의 활성화도 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 제거하기 위한 제어 신호를 사용자로부터 수신할 수 있다.
- [0149] 출력부(12)는 전자 장치(10)에서 처리되는 정보를 표시 출력한다. 출력부(12)는 제1 물질을 전산 모사한 결과에 관련된 데이터를 디스플레이하는 디스플레이부(12-1)를 포함할 수 있다. 예를 들면, 디스플레이부(12-1)는 모델링된 제1 물질의 원자 구조, 제1 물질의 활성화도 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 디스플레이 할 수 있다. 디스플레이부(12-1)는 전자 장치(10)를 제어하는 사용자의 입력을 수신하기 위한 사용자 인터페이스를 디스플레이 할 수 있다.
- [0150] 통신부(15)는, 전자 장치(10)가 다른 장치(미도시) 및 서버(20)와 통신을 하게 하는 하나 이상의 구성요소를 포함할 수 있다. 다른 장치(미도시)는 전자 장치(10)와 같은 컴퓨팅 장치일 수 있으나, 이에 제한되지 않는다.
- [0151] 또한, 통신부(15)는, 촉매로 전산 모사할 제1 물질에 관련된 제1 정보, 화학 반응에 관련된 제2 정보를 다른 장치(미도시) 및 서버(2000)와 송신하고, 다른 장치(미도시) 및 서버(2000)로부터 모델링된 제1 물질의 원자 구조에 관련된 데이터, 제1 물질의 활성화도에 관련된 데이터 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 수신할 수 있다.
- [0152] 메모리(17)는, 프로세서(13)의 처리 및 제어를 위한 프로그램을 저장할 수 있고, 전자 장치(10)로 입력되거나 전자 장치(10)로부터 출력되는 데이터를 저장할 수도 있다.
- [0153] 메모리(17)는 플래시 메모리 타입(flash memory type), 하드디스크 타입(hard disk type), 멀티미디어 카드 마이크로 타입(multimedia card micro type), 카드 타입의 메모리(예를 들어 SD 또는 XD 메모리 등), 램(RAM, Random Access Memory) SRAM(Static Random Access Memory), 롬(ROM, Read-Only Memory), EEPROM(Electrically Erasable Programmable Read-Only Memory), PROM(Programmable Read-Only Memory), 자기 메모리, 자기 디스크, 광디스크 중 적어도 하나의 타입의 저장매체를 포함할 수 있다.
- [0154] 프로세서(13)는 통상적으로 전자 장치(10)의 전반적인 동작을 제어한다. 예를 들면, 프로세서(13)는, 메모리(17)에 저장된 프로그램들을 실행함으로써, 사용자 입력부(11), 출력부(12), 통신부(15) 등을 전반적으로 제어할 수 있다.
- [0155] 또한, 프로세서(13)는 메모리(17)에 저장된 프로그램들을 실행함으로써, 도 1 내지 도 8을 참조하여 위에서 설명한 전자 장치(10)의 기능을 수행할 수 있다.
- [0156] 예를 들면, 프로세서(13)는 제1 정보에 기초하여 상기 제1 물질의 원자 구조를 모델링 할 수 있다. 프로세서(13)는 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 화학 반응에 대한 제1 물질의 활성화도를 산출할 수 있다. 프로세서(13)는 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 화학 반응에 대한 제1 물질의 안정도를 산출할 수 있다.
- [0157] 또한, 프로세서(13)는 산출된 제1 물질의 활성화도에 기초하여, 모델링 된 제1 물질의 활성화 영역을 식별하고, 식별된 활성화 영역을 모델링 된 제1 물질의 원자 구조 위에 표시하도록 디스플레이부(12-1)를 제어할 수 있다.
- [0158] 또한, 프로세서(13)는 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 활성화도를 산출하기 위한 파라미터(parameter)의 값이 프리셋(preset)된 적어도 하나의 제1 전산 모사 방법을 선택할 수 있다. 프로세서(13)는 프리셋된 파라미터의 값을 이용하여 제1 전산 모사 방법을 수행함으로써, 제1 물질의 활성화도를 산출할 수 있다.
- [0159] 또한, 프로세서(13)는 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 활성화도를 산출하는데 적합한 복수의 제1 전산 모사 방법들의 순위를 설정하고, 설정된 순위에 기초하여, 복수의 제1 전산 모사 방법들 중에서 적어도 하나의 모사 방법을 선택할 수 있다.

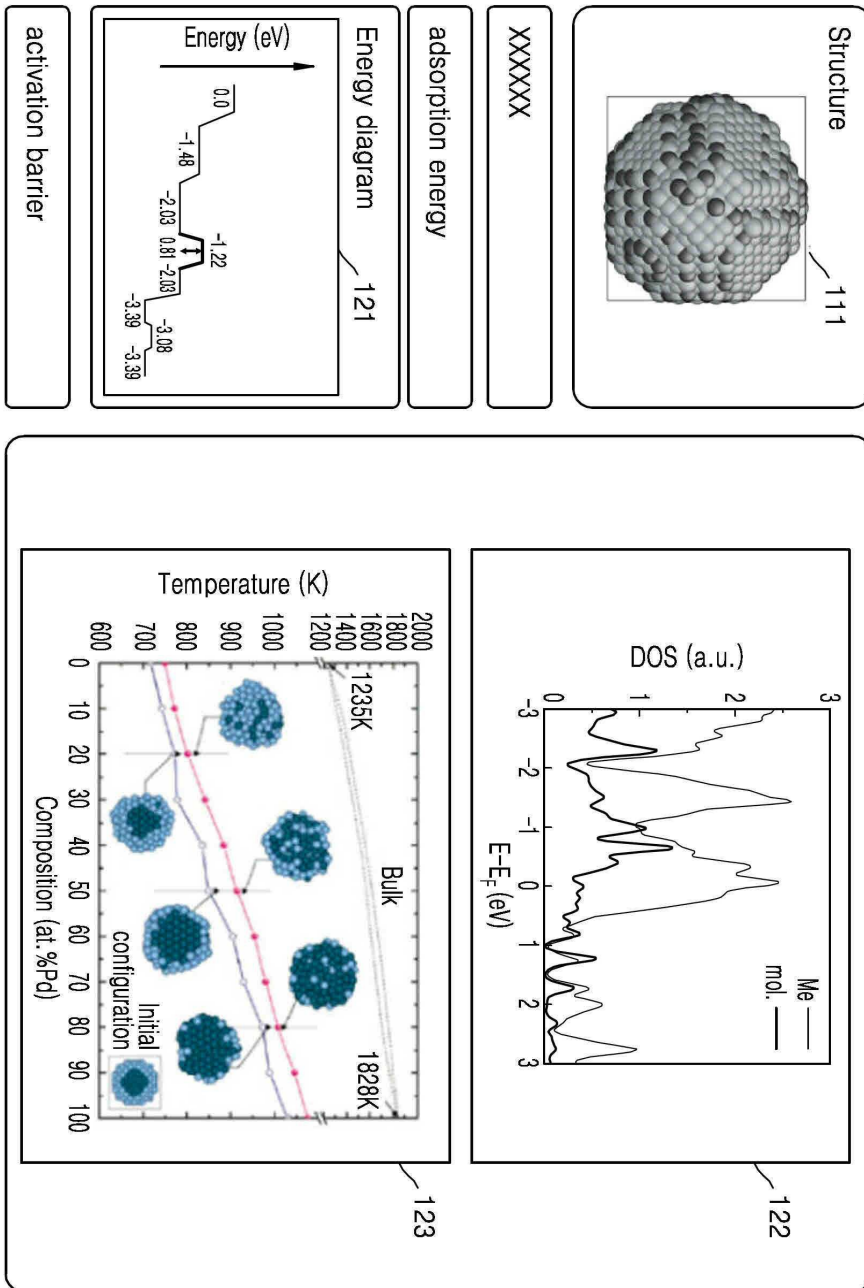
- [0160] 또한, 프로세서(13)는 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 안정도를 계산하기 위한 파라미터(parameter)의 값이 프리셋된 제2 전산 모사 방법을 선택하고, 프리셋된 파라미터의 값을 이용하여 제2 전산 모사 방법을 수행함으로써, 제1 물질의 안정도를 산출할 수 있다.
- [0161] 또한, 프로세서(13)는 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 활성도를 산출하는데 적합한 복수의 제1 전산 모사 방법들의 순위를 설정하고, 설정된 순위에 기초하여, 복수의 제1 전산 모사 방법들 중에서 적어도 하나의 모사 방법을 선택할 수 있다.
- [0162] 또한, 프로세서(13)는 제2 정보 및 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 기초하여, 제1 물질의 안정도를 계산하기 위한 파라미터(parameter)의 값이 프리셋된 제2 전산 모사 방법을 선택하고, 프리셋된 파라미터의 값을 이용하여 상기 제2 전산 모사 방법을 수행함으로써, 제1 물질의 안정도를 산출할 수 있다.
- [0163] 또한, 프로세서(13)는 제1 정보를 수정하는 사용자의 입력에 기초하여, 촉매로 전산 모사할 제2 물질을 모델링할 수 있다. 프로세서(13)는 모델링 된 제2 물질의 원자 구조에 기초하여, 제2 물질의 활성도 및 제2 물질의 안정도를 산출할 수 있다. 프로세서(13)는 모델링 된 제2 물질의 원자 구조, 산출된 제2 물질의 활성도 및 산출된 제2 물질의 안정도 중 적어도 하나에 관련된 데이터를 디스플레이하도록 디스플레이부(12-1)를 제어할 수 있다.
- [0164] 또한, 프로세서(13)는 화학 반응의 반응 경로에 관련된 흡착물을 식별할 수 있다. 프로세서(13)는 식별된 흡착물의 흡착 에너지에 기초하여, 제1 물질의 활성도를 산출할 수 있다. 프로세서(13)는 식별된 흡착물에 기초하여 제1 물질의 원자 구조의 변화를 모델링함으로써, 제1 물질의 안정도를 산출할 수 있다.
- [0165] 또한, 프로세서(13)는 외부 환경 변수에 기초하여 흡착 에너지를 보정함으로써, 제1 물질의 활성도를 재산출할 수 있다. 프로세서(13)는 외부 환경 변수에 기초하여 제1 물질의 원자 구조의 변화를 재모델링함으로써, 제1 물질의 안정도는 재산출할 수 있다.
- [0166] 또한, 프로세서(13)는 제1 반응 단계의 에너지에 기초하여, 제1 물질의 활성도를 산출하고, 제1 반응 단계에 대응하는 흡착물이 흡착된 제1 물질의 원자 구조를 모델링함으로써, 제1 물질의 안정도를 산출할 수 있다.
- [0167] 또한, 프로세서(13)는 산출된 제1 물질의 안정도에 기초하여, 제1 정보를 수정함으로써, 제2 물질을 모델링할 수 있다. 프로세서(13)는 모델링 된 제2 물질의 원자 구조에 기초하여, 제2 물질의 활성도 및 제2 물질의 안정도를 산출할 수 있다. 프로세서(13)는 모델링 된 제2 물질의 원자 구조, 산출된 제2 물질의 활성도 및 산출된 제2 물질의 안정도 중 적어도 하나에 관련된 데이터를 디스플레이하도록 디스플레이부(12-1)를 제어할 수 있다.
- [0169] 도 10은 일 실시예에 따른, 서버의 블록도이다
- [0170] 도 10을 참조하면, 서버(2000)는 통신부(2500), DB(2700) 및 제어부(2300)를 포함할 수 있다.
- [0171] 서버(2000)는 도 1 내지 도 8을 참조하여 위에서 설명한, 전자 장치(1000)가 제1 물질을 전산 모사하는 방법을 수행할 수 있다. 중복되는 내용은 위에서 설명하였으므로, 생략한다.
- [0172] 통신부(25)는 전자 장치(10)와 통신을 하게 하는 하나 이상의 구성요소를 포함할 수 있다.
- [0173] 통신부(25)는, 촉매로 전산 모사할 제1 물질에 관련된 제1 정보, 화학 반응에 관련된 제2 정보를 전자 장치(10)로부터 수신하고, 모델링 된 제1 물질의 원자 구조에 관련된 데이터, 제1 물질의 활성도에 관련된 데이터 및 제1 물질의 안정도에 관련된 데이터 중 적어도 하나를 전자 장치(10)로 송신할 수 있다.
- [0174] DB(2700)는 제1 물질을 전산 모사하기 위해 필요한 데이터 및 프로그램을 저장할 수 있다.
- [0175] 프로세서(23)는 통상적으로 서버(20)의 전반적인 동작을 제어한다. 예를 들어, 프로세서(23)는, 서버(20)의 DB(27)에 저장된 프로그램들을 실행함으로써, DB(27) 및 통신부(25) 등을 전반적으로 제어할 수 있다. 프로세서(23)는 DB(27)에 저장된 프로그램들을 실행함으로써, 도 1 내지 도 8을 참조하여 위에서 설명한 전자 장치(10)의 동작의 적어도 일부를 수행할 수 있다.
- [0177] 일부 실시예는 컴퓨터에 의해 실행되는 프로그램 모듈과 같은 컴퓨터에 의해 실행가능한 명령어를 포함하는 기록 매체의 형태로도 구현될 수 있다. 컴퓨터 판독 가능 매체는 컴퓨터에 의해 액세스될 수 있는 임의의 가용 매체일 수 있고, 휘발성 및 비휘발성 매체, 분리형 및 비분리형 매체를 모두 포함한다. 또한, 컴퓨터 판독가능 매

체는 컴퓨터 저장 매체 및 통신 매체를 모두 포함할 수 있다. 컴퓨터 저장 매체는 컴퓨터 판독가능 명령어, 데이터 구조, 프로그램 모듈 또는 기타 데이터와 같은 정보의 저장을 위한 임의의 방법 또는 기술로 구현된 휘발성 및 비휘발성, 분리형 및 비분리형 매체를 모두 포함한다. 통신 매체는 전형적으로 컴퓨터 판독가능 명령어, 데이터 구조, 프로그램 모듈을 포함한다.

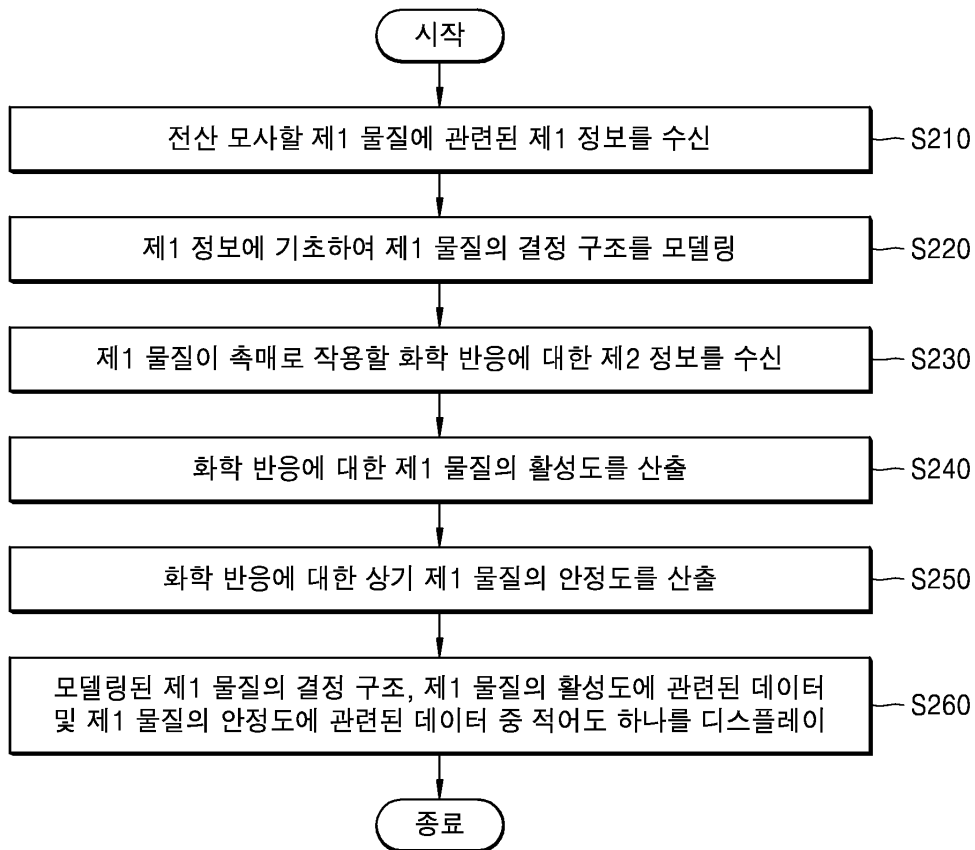
- [0178] 또한, 본 명세서에서, “부”는 프로세서 또는 회로와 같은 하드웨어 구성(hardware component), 및/또는 프로세서와 같은 하드웨어 구성에 의해 실행되는 소프트웨어 구성(software component)일 수 있다.
- [0179] 전술한 본 발명의 설명은 예시를 위한 것이며, 본 발명이 속하는 기술분야의 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 쉽게 변형이 가능하다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다. 예를 들어, 단일형으로 설명되어 있는 각 구성 요소는 분산되어 실시될 수도 있으며, 마찬가지로 분산된 것으로 설명되어 있는 구성 요소들도 결합된 형태로 실시될 수 있다.
- [0180] 본 발명의 범위는 상기 상세한 설명보다는 후술하는 특허청구범위에 의하여 나타내어지며, 특허청구범위의 의미 및 범위 그리고 그 균등 개념으로부터 도출되는 모든 변경 또는 변형된 형태가 본 발명의 범위에 포함되는 것으로 해석되어야 한다.

도면

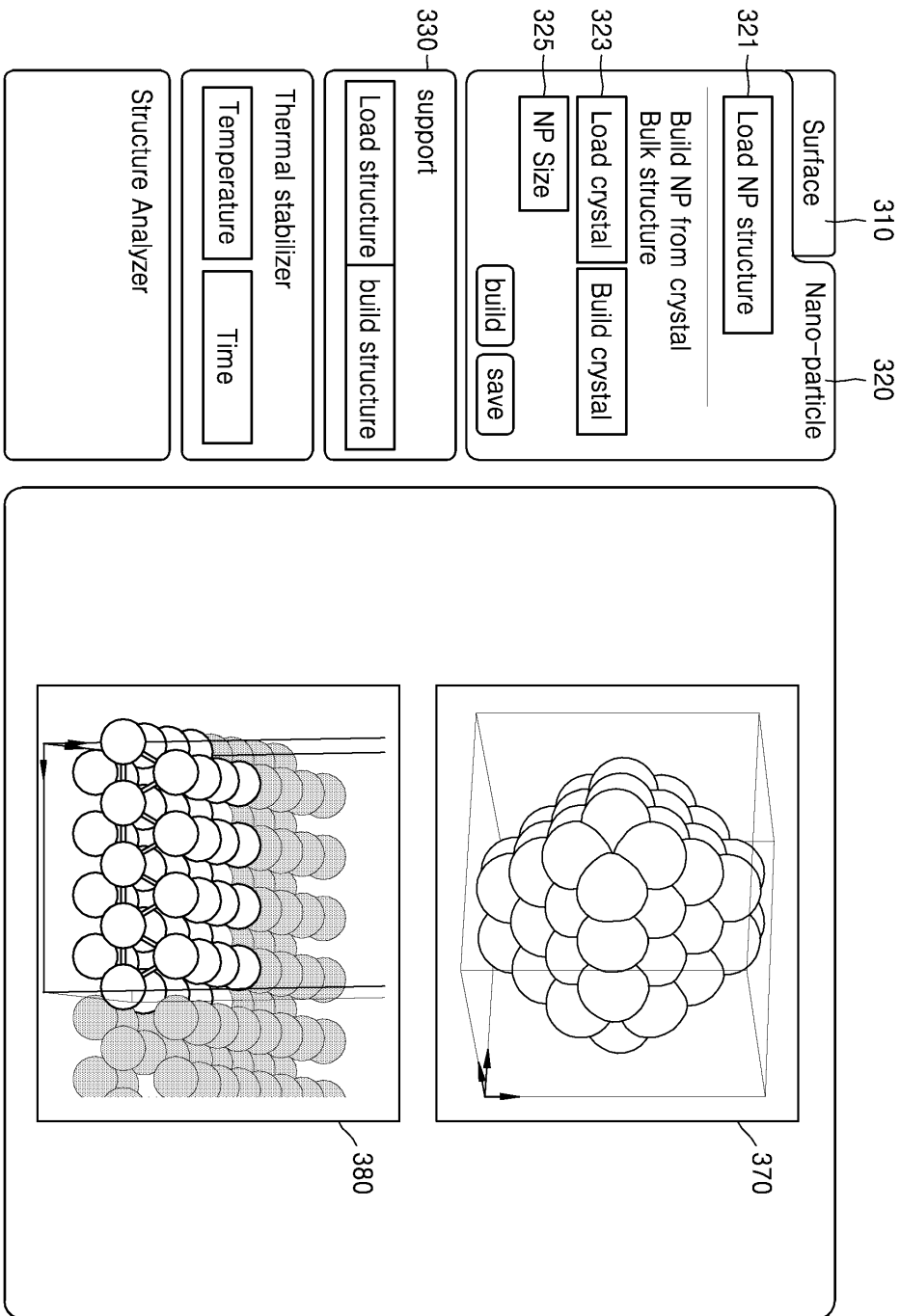
도면1



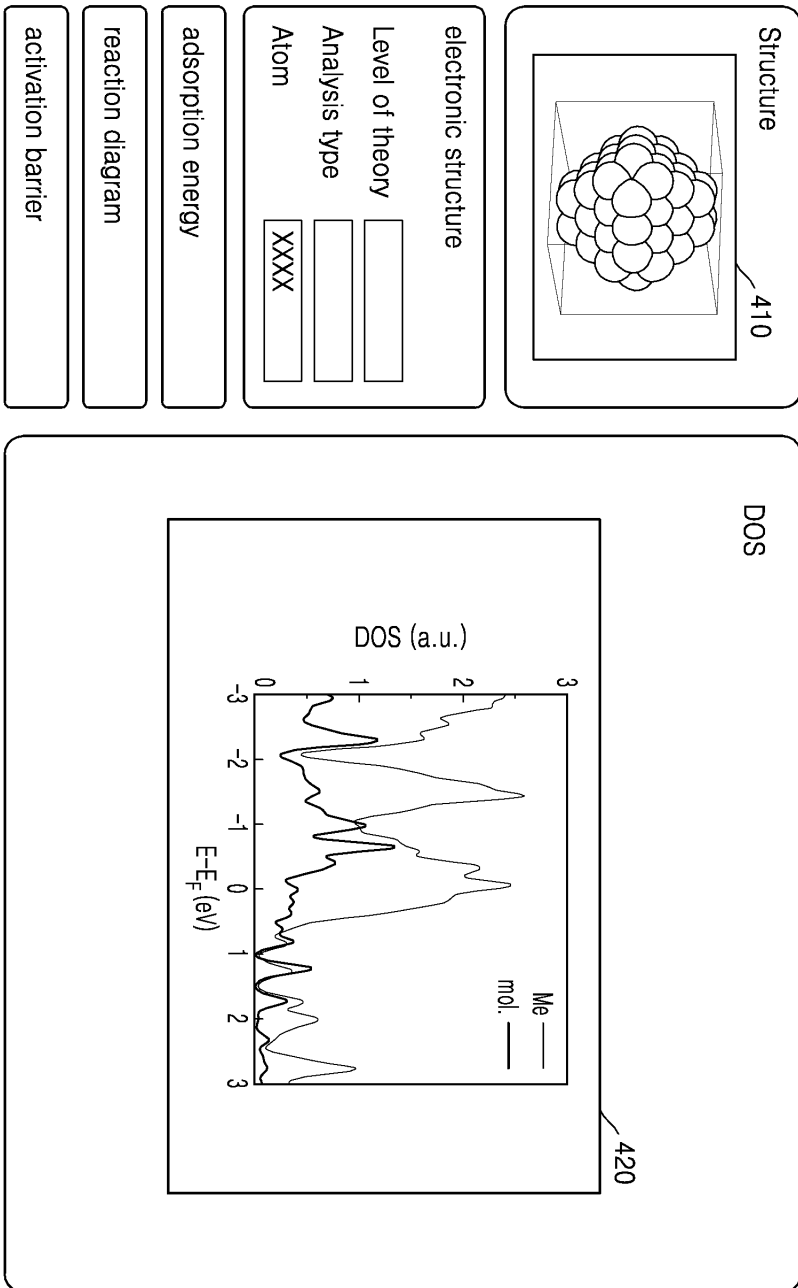
도면2



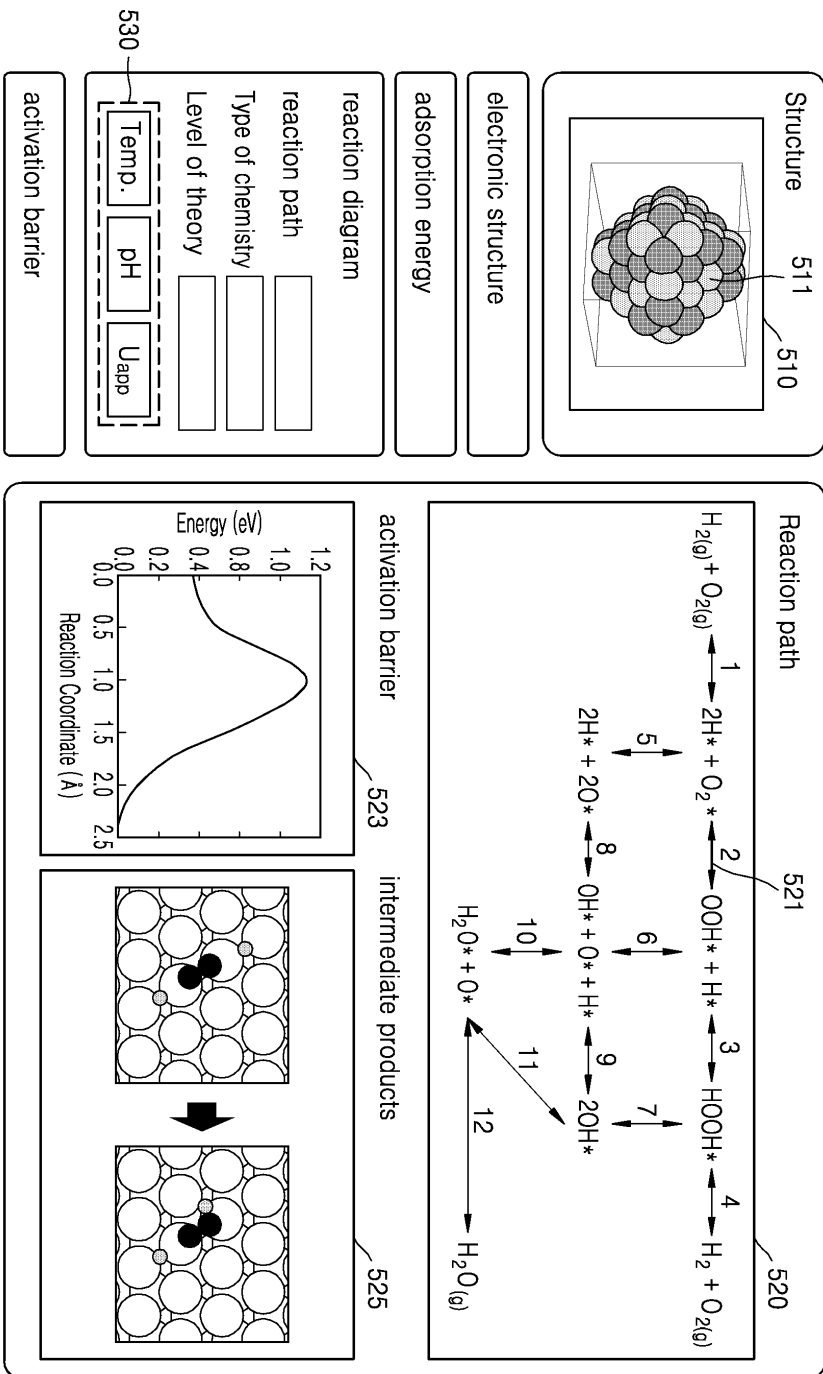
도면3



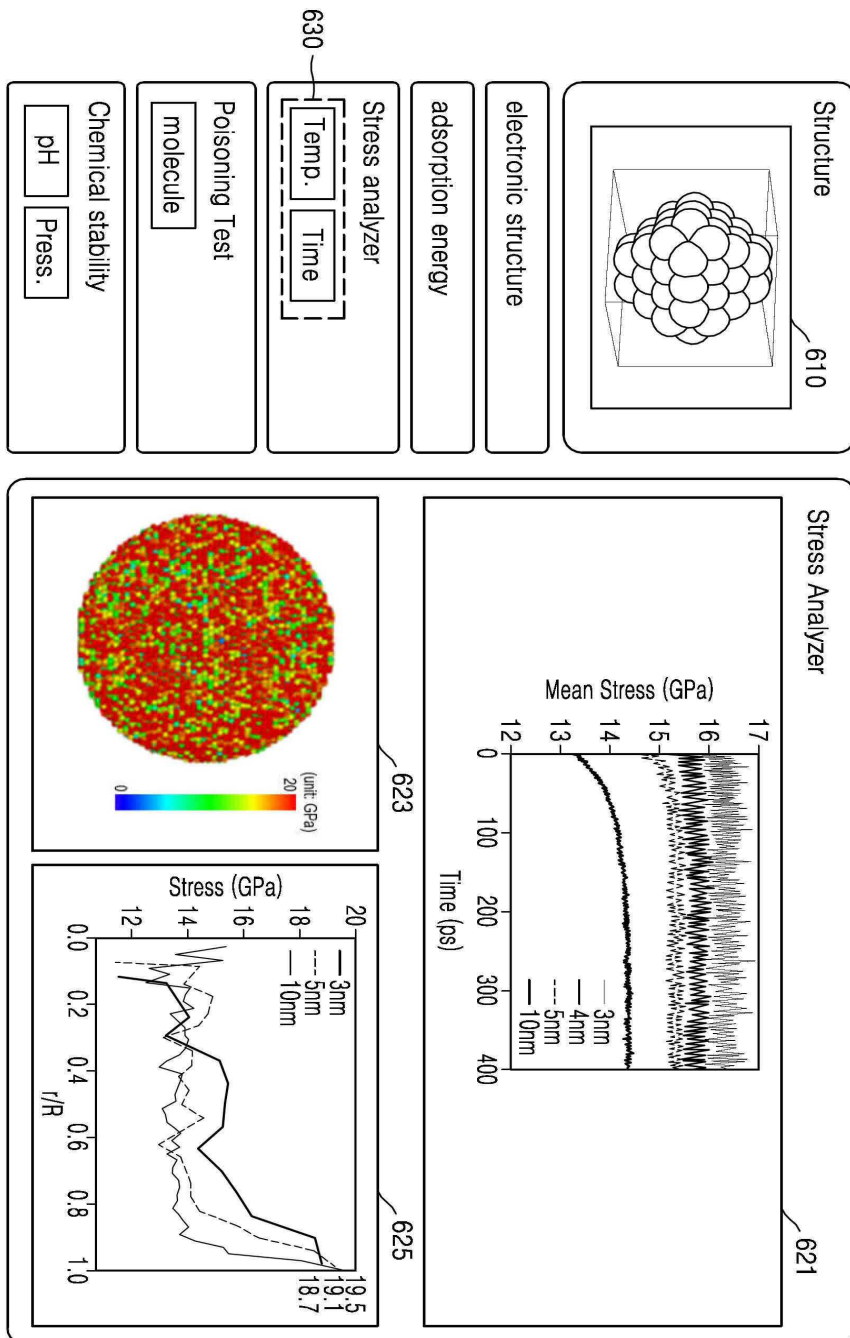
도면4



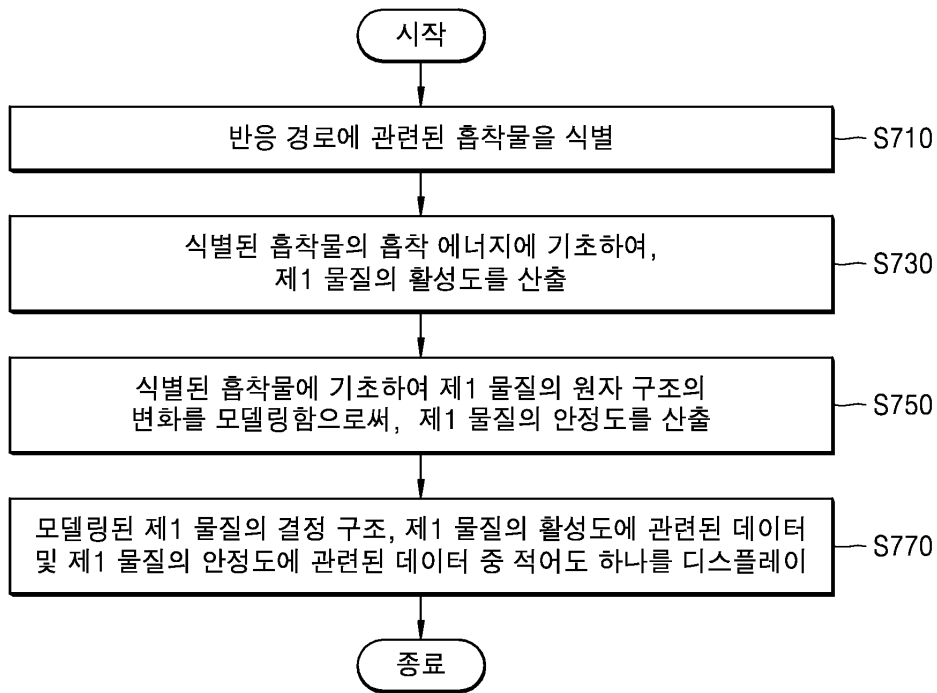
도면5



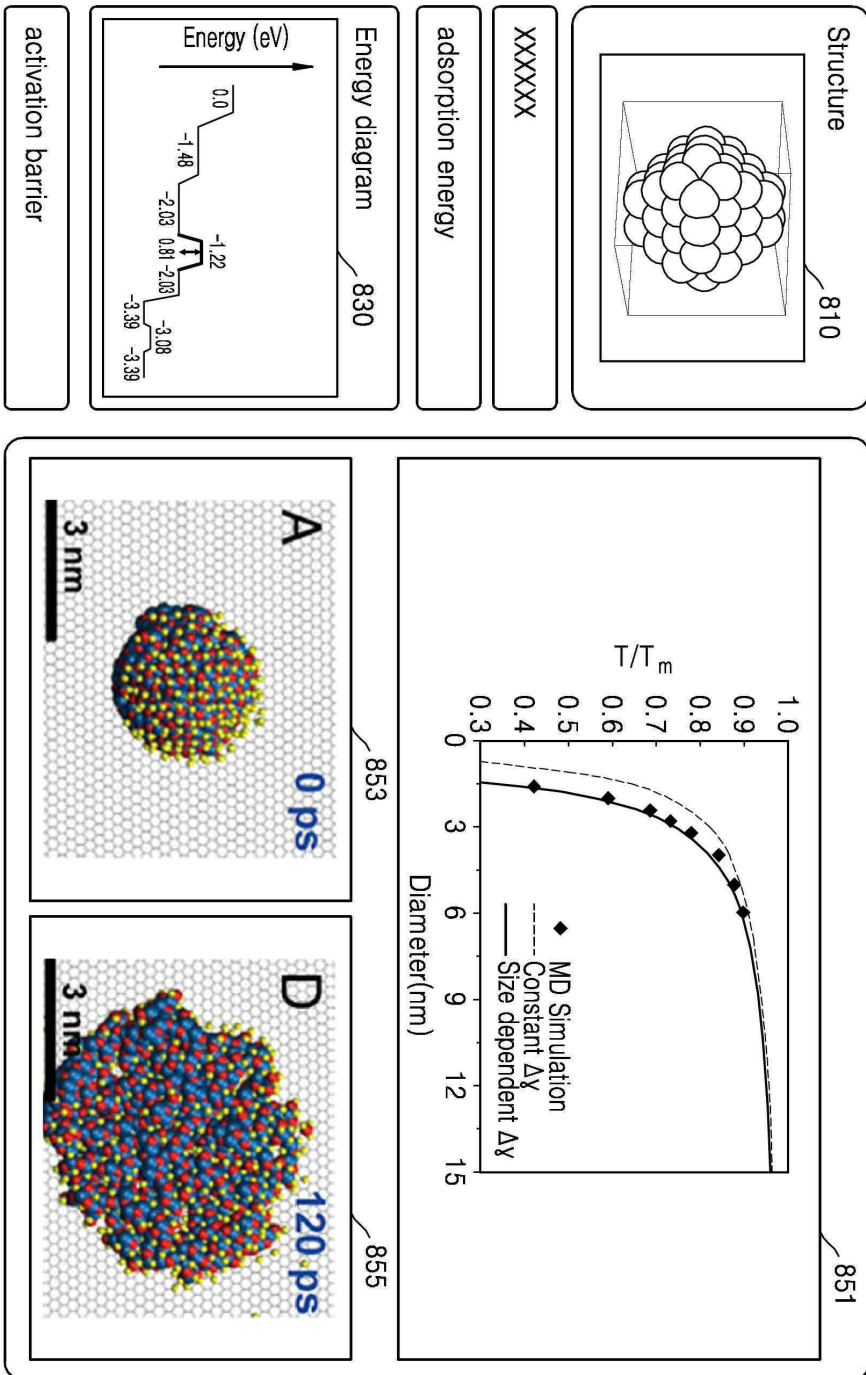
도면6



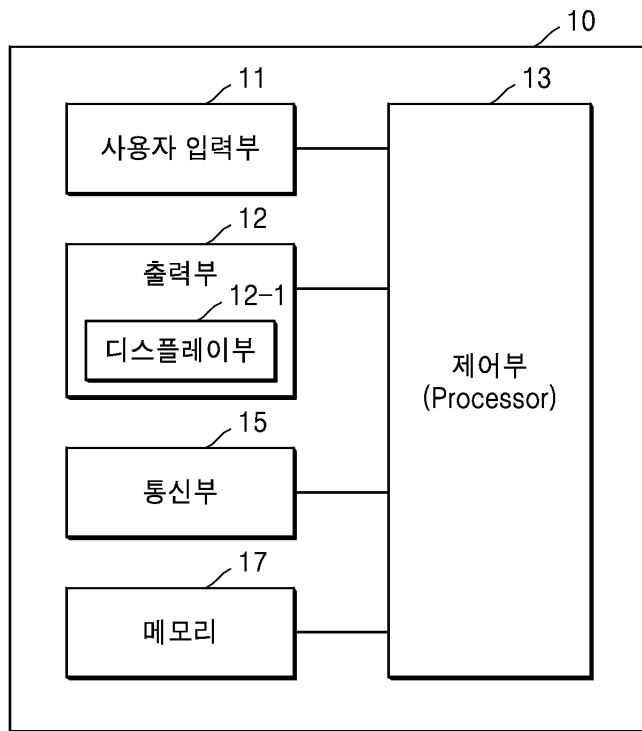
도면7



도면8



도면9



도면10

