(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2021-0039293
(43) 공개일자 2021년04월09일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
B22F 1/00 (2006.01) *B22F 9/00* (2006.01)
(52) CPC특허분류
B22F 1/0085 (2013.01)
B22F 1/0007 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2020-0124066
(22) 출원일자 2020년09월24일
심사청구일자 2020년09월24일
(30) 우선권주장
1020190121576 2019년10월01일 대한민국(KR)

(71) 출원인
서강대학교산학협력단
서울특별시 마포구 백범로 35 (신수동, 서강대학교)
(72) 발명자
김동철
서울 마포구 신수동1 백범로 35 서강대학교 아담샬관 701호
곽태진
서울 마포구 신수동1 백범로 35 서강대학교
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인세림

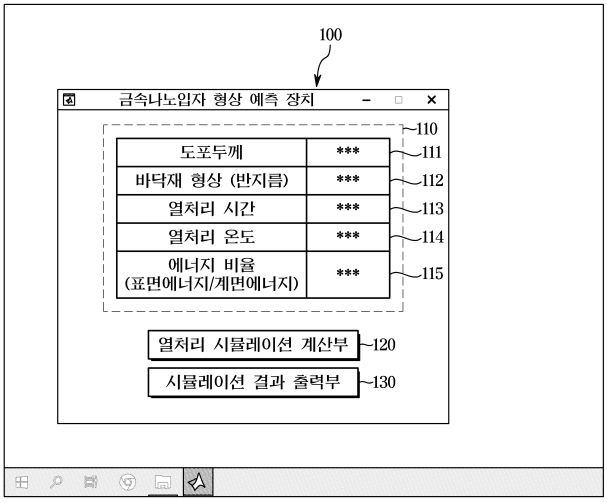
전체 청구항 수 : 총 8 항

(54) 발명의 명칭 **열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치 및 그 예측 방법**

(57) 요 약

열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치가 개시된다. 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치는, 열처리 과정에서 금속나노입자의 형상 변화를 예측하기 위해 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 입력하도록 마련된 시뮬레이션 조건 입력부; 입력된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 확인하고, 확인된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보에 기초하여 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산하고, 계산된 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식과 확인된 열처리 정보에 기초하여 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산하는 열처리 시뮬레이션 계산부; 및 계산된 금속나노입자가 변화하는 형상에 응답하여 열처리 과정의 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 출력하는 시뮬레이션 결과 출력부를 포함할 수 있다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류
B22F 9/00 (2013.01)
(72) 발명자
강태욱
서울특별시 마포구 신수동1 백범로 35 서강대학교 리치과학관 611호
이현주
제주특별자치도 제주시 인다12길 34 5층 501호 (아라일동, 위드빌)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1711104218
과제번호	202032010
부처명	과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명	한국연구재단
연구사업명	C1가스리파이너리사업
연구과제명	표면증강라만분광법을 이용한 비평형 용존 C1 가스 및 대사산물 실시간 모니터링 기술개발
기 여 율	1/1
과제수행기관명	서강대학교산학협력단
연구기간	2020.01.01 ~ 2020.12.31

명 세 서

청구범위

청구항 1

열처리 과정에서 금속나노입자의 형상 변화를 예측하기 위해 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 입력하도록 마련된 시뮬레이션 조건 입력부;

상기 입력된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 확인하고, 상기 확인된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보에 기초하여 상기 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산하고, 상기 계산된 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식과 상기 확인된 열처리 정보에 기초하여 상기 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산하는 열처리 시뮬레이션 계산부; 및

상기 계산된 금속나노입자가 변화하는 형상에 응답하여 열처리 과정의 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 출력하는 시뮬레이션 결과 출력부를 포함하는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 바닥재 정보는 바닥재 형상을 포함하는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 금속나노입자 형성 정보는 열처리전의 금속나노구조체의 도포두께, 금속나노입자의 표면에너지 및 금속나노입자와 바닥재의 계면에너지 사이의 비율을 포함하는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 열처리 정보는 열처리 시간과 열처리 온도를 포함하는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 열처리 시뮬레이션 계산부는,

상기 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산할 때에, 도포금속, 바닥재, 부피, 미소 부피, 금속나노입자의 화학적 잠재에너지, 금속나노입자의 표면에너지, 바닥재의 표면에너지, 금속나노입자와 바닥재의 계면에너지를 이용하는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 열처리 시뮬레이션 계산부는,

상기 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산할 때에, 구배, 열처리 정보, 온도에 따른 금속나노입자의 이동성 함수, 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식, 금속나노입자의 분포 정의 함수를 이용하는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 시뮬레이션 결과 출력부는,

상기 열처리 과정의 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 ASCII 파일로 출력하는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치.

청구항 8

열처리 과정에서 금속나노입자의 형상 변화를 예측하기 위해 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 입력하고,

상기 입력된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 확인하고,

상기 확인된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보에 기초하여 상기 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산하고,

상기 계산된 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식과 상기 확인된 열처리 정보에 기초하여 상기 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산하고,

상기 계산된 금속나노입자가 변화하는 형상에 응답하여 열처리 과정의 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 출력하는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 방법.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 개시된 발명은 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치 및 그 예측 방법에 관한 것으로써, 더욱 상세하게는 컴퓨터 시뮬레이션을 이용하여 금속나노입자의 열처리 과정에서 형상의 변화를 시간에 따라 예측하고, 해당 나노입자를 제작할 수 있는 열처리 제작 공정 조건을 제공할 수 있는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치 및 그 예측 방법에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 일반적으로 나노입자는 적어도 한 차원이 100nm, 다시 말해 천만분의 1미터(100nm=100.0×10-9m) 이하인 입자이다. 분자나 원자를 조작하여 새로운 소재, 구조, 기계, 기구, 소자를 제작하고 그 구조를 연구하는 나노기술의 영역에 속하는 입자이다.

[0003] 나노입자는 금, 은, 실리카, 이황화합물(sulfide)이 대표적이다. 나노입자는 작은 크기에 기인하는 특이하고도 다양한 성질을 보이므로 바이오 칩, 초소형 바이오 센서, 디스플레이 제조 등에 널리 사용된다.

[0004] 최근에는, 금속나노입자의 열처리 과정에서 형상의 변화를 시간에 따라 예측할 수 있는 시뮬레이션의 개발에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0005] 이상의 이유로, 개시된 발명의 일 측면은 컴퓨터 시뮬레이션을 이용하여 금속나노입자의 열처리 과정에서 형상의 변화를 시간에 따라 예측할 수 있는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치 및 그 예측 방법을 제공하고자 한다.

[0006] 개시된 발명의 다른 측면은 해당 나노입자를 제작할 수 있는 열처리 제작 공정 조건을 제공할 수 있는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치 및 그 예측 방법을 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0007] 개시된 발명의 일 측면에 따른 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치는, 열처리 과정에서 금속나노입자의 형상 변화를 예측하기 위해 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 입력하도록 마련된 시뮬레이션 조건 입력부; 상기 입력된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 확인하고, 상기 확인된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보에 기초하여 상기 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산하고, 상기 계산된 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식과 상기 확인된 열처리 정보에 기초하여 상

기 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산하는 열처리 시뮬레이션 계산부; 및 상기 계산된 금속나노입자가 변화하는 형상에 응답하여 열처리후의 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 출력하는 시뮬레이션 결과 출력부를 포함할 수 있다.

[0008] 상기 바닥재 정보는 바닥재 형상을 포함할 수 있다.

[0009] 상기 금속나노입자 형성 정보는 열처리전의 금속나노구조체의 도포두께, 금속나노입자의 표면에너지 및 금속나노입자와 바닥재의 계면에너지 사이의 비율을 포함할 수 있다.

[0010] 상기 열처리 정보는 열처리 시간과 열처리 온도를 포함할 수 있다.

[0011] 상기 열처리 시뮬레이션 계산부는 상기 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산할 때에, 도포금속, 바닥재, 부피, 미소 부피, 금속나노입자의 화학적 잠재에너지, 금속나노입자의 표면에너지, 바닥재의 표면에너지, 금속나노입자와 바닥재의 계면에너지를 이용할 수 있다.

[0012] 상기 열처리 시뮬레이션 계산부는 상기 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산할 때에, 구배, 열처리 정보, 온도에 따른 금속나노입자의 이동성 함수, 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식, 금속나노입자의 분포 정의 함수를 이용할 수 있다.

[0013] 상기 시뮬레이션 결과 출력부는 상기 열처리후의 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 ASCII 파일로 출력할 수 있다.

[0014] 개시된 발명의 다른 측면에 따른 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 방법은, 열처리 과정에서 금속나노입자의 형상 변화를 예측하기 위해 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 입력하고, 상기 입력된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 확인하고, 상기 확인된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보에 기초하여 상기 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산하고, 상기 계산된 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식과 상기 확인된 열처리 정보에 기초하여 상기 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산하고, 상기 계산된 금속나노입자가 변화하는 형상에 응답하여 열처리후의 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 출력할 수 있다.

발명의 효과

[0015] 개시된 발명의 일 측면에 따르면, 컴퓨터 시뮬레이션을 이용하여 금속나노입자의 열처리 과정에서 형상의 변화를 시간에 따라 예측할 수 있는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치 및 그 예측 방법을 제공할 수 있다.

[0016] 개시된 발명의 다른 측면에 따르면, 해당 나노입자를 제작할 수 있는 열처리 제작 공정 조건을 제공할 수 있는 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치 및 그 예측 방법을 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0017] 도 1은 일 실시예에 의한 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치를 도시한다.

도 2는 열처리 시뮬레이션 계산부에 의해 열처리 과정에서 각 위치에서의 금속나노입자의 움직임을 계산하는 것을 도시한다.

도 3은 시뮬레이션 결과 출력부에 의해 시간에 따라 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 출력한 것을 도시한다.

도 4는 시뮬레이션 결과 출력부에 의해 도포 두께와 바닥재 형상에 따라 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 출력한 것을 도시한다.

도 5는 시뮬레이션 결과 출력부에 의해 제 3 형상 정보에 대한 예측 결과물을 3차원 이미지로 출력하는 과정을 도시한다.

도 6은 일 실시예에 의한 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 방법의 일 예를 도시한다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0018] 명세서 전체에 걸쳐 동일 참조 부호는 동일 구성요소를 지칭한다. 본 명세서가 실시예들의 모든 요소들을 설명하는 것은 아니며, 개시된 발명이 속하는 기술분야에서 일반적인 내용 또는 실시예들 간에 중복되는 내용은 생

략한다. 명세서에서 사용되는 '부, 모듈, 부재, 블록'이라는 용어는 소프트웨어 또는 하드웨어로 구현될 수 있으며, 실시예들에 따라 복수의 '부, 모듈, 부재, 블록'이 하나의 구성요소로 구현되거나, 하나의 '부, 모듈, 부재, 블록'이 복수의 구성요소들을 포함하는 것도 가능하다.

[0019] 명세서 전체에서, 어떤 부분이 다른 부분과 "연결"되어 있다고 할 때, 이는 직접적으로 연결되어 있는 경우뿐 아니라, 간접적으로 연결되어 있는 경우를 포함하고, 간접적인 연결은 무선 통신망을 통해 연결되는 것을 포함한다.

[0020] 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.

[0021] 명세서 전체에서, 어떤 부재가 다른 부재 "상에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부재가 다른 부재에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부재 사이에 또 다른 부재가 존재하는 경우도 포함한다.

[0022] 제 1, 제 2 등의 용어는 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하기 위해 사용되는 것으로, 구성요소가 전술된 용어들에 의해 제한되는 것은 아니다.

[0023] 단수의 표현은 문맥상 명백하게 예외가 있지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.

[0024] 각 단계들에 있어 식별부호는 설명의 편의를 위하여 사용되는 것으로 식별부호는 각 단계들의 순서를 설명하는 것이 아니며, 각 단계들은 문맥상 명백하게 특정 순서를 기재하지 않는 이상 명기된 순서와 다르게 실시될 수 있다.

[0025] 이하 첨부된 도면들을 참고하여 개시된 발명의 작용 원리 및 실시예들에 대해 설명한다.

[0026] 이하에서는 컴퓨터 시뮬레이션을 이용하여 금속나노입자의 열처리 과정에서 형상의 변화를 시간에 따라 예측하고, 해당 나노입자를 제작할 수 있는 열처리 제작 공정 조건을 제공할 수 있는 금속나노입자의 형상 예측 장치를 살펴보기로 한다.

[0027] 도 1은 일 실시예에 의한 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치를 도시한다.

[0028] 도 1에 도시된 바와 같이, 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치(100)는 프로그램으로 제공될 수 있다. 프로그램은 시뮬레이션 조건 입력부(110), 열처리 시뮬레이션 계산부(120), 시뮬레이션 결과 출력부(130)를 포함할 수 있다.

[0029] 시뮬레이션 조건 입력부(110)는 열처리 과정에서 금속나노입자의 형상 변화를 예측하기 위해 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 입력하도록 마련될 수 있다. 사용자는 시뮬레이션 조건 입력부(110)에 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 입력할 수 있다. 금속나노입자는 Raman 신호를 측정할 때 신호의 세기를 향상시킬 수 있다.

[0030] 바닥재 정보는 바닥재 형상(112)을 포함할 수 있다. 예를 들어, 바닥재 형상(112)은 반지름일 수 있다. 금속나노입자 형성 정보는 열처리 과정의 금속나노입자의 형상을 고려하기 위한 것으로, 열처리전의 금속나노구조체의 도포두께(111), 금속나노입자의 표면에너지 및 금속나노입자와 바닥재의 계면에너지 사이의 비율(115)을 포함할 수 있다. 열처리 정보는 열처리 시간(113)과 열처리 온도(114)를 포함할 수 있다.

[0031] 사용자는 열처리 시뮬레이션 계산부(120)를 클릭하여 열처리 시뮬레이션 계산부(120)를 수행시킬 수 있다.

[0032] 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 시뮬레이션 조건 입력부(110)에 의해 입력된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 확인할 수 있다.

[0033] 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 확인된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보에 기초하여 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산할 수 있다. 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 사용자가 입력한 바닥재 형상(112), 열처리전의 금속나노구조체의 도포두께(111), 금속나노입자의 표면에너지 및 금속나노입자와 바닥재의 계면에너지 사이의 비율(115)을 확인하여 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산할 수 있다.

[0034] 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산할 때에, 도포금속, 바닥재, 부피, 미소 부피, 금속나노입자의 화학적 잠재에너지, 금속나노입자의 표면에너지, 바닥재의 표면에너지, 금속나노입자와 바닥재의 계면에너지를 이용할 수 있다. 예를 들어, 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식은 하기 [수학식 1]과 같이 나타낼 수 있다.

[0035] [수학식 1]

[0036] $$F = \int_V \left\{ f_{ch}(c_1, c_2) + h_{11}(\nabla c_1)^2 + h_{22}(\nabla c_2)^2 + h_{12}(\nabla c_1 \nabla c_2) \right\} dV$$

[0037] F 는 금속나노입자가 존재하는 계의 총 에너지이고, V 는 부피이고, f_{ch} 는 금속나노입자의 화학적 잠재에너지이고, c_1 은 도포금속이고, c_2 는 바닥재이고, h_{11} 은 바닥재의 표면에너지이고, ∇ 는 구배(Gradient)이고, h_{22} 는 금속나노입자의 표면에너지이고, h_{12} 는 금속나노입자와 바닥재의 계면에너지이고, dV 는 미소 부피일 수 있다.

[0038] 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 계산된 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식과 확인된 열처리 정보에 기초하여 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산할 수 있다. 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 계산한 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식과 열처리 온도(114)와 열처리 시간(113)을 확인하여 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산할 수 있다.

[0039] 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산할 때에, 구배, 열처리 정보, 온도에 따른 금속나노입자의 이동성 함수, 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식, 금속나노입자의 분포 정의 함수를 이용할 수 있다. 예를 들어, 열처리 시간에 의해 변화하는 금속나노입자의 형상을 예측하는 방정식은 하기 [수학식 2]와 같이 나타낼 수 있다.

[0040] [수학식 2]

[0041] $$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ D(T) \nabla \frac{\partial F}{\partial c} \right\}$$

[0042] $\frac{\partial c}{\partial t}$ 는 열처리 시간에 의해 변화하는 금속나노입자의 형상이고, t 는 열처리 시간이고, c 는 금속나노입자의 분포 정의 함수(c_1 : 도포금속, c_2 : 바닥재)이고, ∇ 는 구배(Gradient)이고, T 는 온도이고, $D(T)$ 는 온도에 따른 금속나노입자의 이동성 함수이고, F 는 금속나노입자가 존재하는 계의 총 에너지이고, $\frac{\partial F}{\partial c}$ 는 금속나노입자의 분포 정의 함수에 의해 변화하는 금속나노입자가 존재하는 계의 총 에너지일 수 있다.

[0043] 이러한, 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 열처리 시간에 의해 변화하는 금속나노입자의 형상을 계산할 때에, 바닥재의 상부에 도포된 금속나노입자가 열처리 과정에서 발생하는 자기조립(Self-Assembly) 현상을 고려하여 계산할 수 있다. 자기조립은 물질이 자발적으로 조직적인 구조나 형태를 형성하는 성질을 말한다.

[0044] 도 2는 열처리 시뮬레이션 계산부에 의해 열처리 과정에서 각 위치에서의 금속나노입자의 움직임을 계산하는 것을 도시한다.

[0045] 도 2에 도시된 바와 같이, 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 열처리 시간에 의해 변화하는 금속나노입자의 형상을 예측하는 방정식을 이용하여 열처리 과정에서 각 위치(x, y, z)에서의 금속나노입자의 움직임을 계산할 수 있다. 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 바닥재(M)의 상부에 일정한 도포 두께로 도포된 도포 금속(P)이 열처리 시간에 의해 변화하여 형성되는 금속나노입자의 움직임을 계산할 수 있다. 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 계산된 금속나노입자의 움직임에 기초하여 금속나노입자가 변화하는 형상을 예측할 수 있다.

[0046] 사용자는 시뮬레이션 결과 출력부(130)를 클릭하여 시뮬레이션 결과 출력부(130)를 수행시킬 수 있다.

[0047] 시뮬레이션 결과 출력부(130)는 열처리 시뮬레이션 계산부(120)에 의해 계산된 금속나노입자가 변화하는 형상에 응답하여 열처리 과정의 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 출력할 수 있다.

[0048] 시뮬레이션 결과 출력부(130)는 열처리 과정의 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 ASCII 파일로 출력할 수 있다. 시뮬레이션 결과 출력부(130)는 예측 결과물을 3차원 이미지로 출력할 수 있다. 사용자

는 예측 결과물에 대한 출력 간격을 설정할 수 있다.

[0049] 도 3은 시뮬레이션 결과 출력부에 의해 시간에 따라 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 출력한 것을 도시한다.

[0050] 도 3에 도시된 바와 같이, 시뮬레이션 결과 출력부(130)는 시간 단위에 따라 열처리 과정의 금속나노입자의 변화하는 제 1 형상 정보, 제 2 형상 정보, 제 3 형상 정보, 제 4 형상 정보에 대한 예측 결과물을 3차원 이미지로 각각 출력할 수 있다.

[0051] 도 4는 시뮬레이션 결과 출력부에 의해 도포 두께와 바닥재 형상에 따라 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 출력한 것을 도시한다.

[0052] 도 4에 도시된 바와 같이, 시뮬레이션 결과 출력부(130)는 열처리 과정의 도포 두께와 바닥재 형상에 따라 금속나노입자의 변화하는 제 1 형상 정보(A), 제 2 형상 정보(B: B1~B10), 제 3 형상 정보(C: C1~C7), 제 4 형상 정보(D: D1~D2)에 대한 예측 결과물을 3차원 이미지로 각각 출력할 수 있다.

[0053] 예를 들어, 제 1 형상 정보(A)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 30nm이고 도포 두께가 11nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다.

[0054] 제 2 형상 정보(B1)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 30nm이고 도포 두께가 5nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다. 제 2 형상 정보(B2)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 30nm이고 도포 두께가 7nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다. 제 2 형상 정보(B3)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 40nm이고 도포 두께가 7nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다.

[0055] 또한, 제 2 형상 정보(B4)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 30nm이고 도포 두께가 9nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다. 제 2 형상 정보(B5)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 40nm이고 도포 두께가 9nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다. 제 2 형상 정보(B6)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 50nm이고 도포 두께가 9nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다. 제 2 형상 정보(B7)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 60nm이고 도포 두께가 9nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다.

[0056] 또한, 제 2 형상 정보(B8)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 40nm이고 도포 두께가 11nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다. 제 2 형상 정보(B9)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 50nm이고 도포 두께가 11nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다. 제 2 형상 정보(B10)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 60nm이고 도포 두께가 11nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다.

[0057] 제 3 형상 정보(C1)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 40nm이고 도포 두께가 5nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다. 제 3 형상 정보(C2)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 50nm이고 도포 두께가 5nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다.

[0058] 또한, 제 3 형상 정보(C3)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 50nm이고 도포 두께가 7nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다. 제 3 형상 정보(C4)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 60nm이고 도포 두께가 7nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다. 제 3 형상 정보(C5)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 70nm이고 도포 두께가 7nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다.

[0059] 또한, 제 3 형상 정보(C6)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 70nm이고 도포 두께가 9nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다. 제 3 형상 정보(C7)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 70nm이고 도포 두께가 11nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다.

[0060] 제 4 형상 정보(D1)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 60nm이고 도포 두께가 5nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다. 제 4 형상 정보(D2)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 70nm이고 도포 두께가 5nm일 때의 금속나노입자의 변화하는 형상일 수 있다.

[0061] 도 5는 시뮬레이션 결과 출력부에 의해 제 3 형상 정보에 대한 예측 결과물을 3차원 이미지로 출력하는 과정을 도시한다.

[0062] 도 5에 도시된 바와 같이, 시뮬레이션 결과 출력부(130)는 제 3 형상 정보(C2)에 대한 예측 결과물을 3차원 이미지로 출력할 때에, 광학적 특성이 향상된 금속나노입자의 형상을 출력할 수 있다. 예를 들어, 시뮬레이션 결과 출력부(130)는 바닥재 형상인 바닥재 반지름이 50nm이고 도포 두께가 5nm일 때의 열처리가 진행된 금속나노입자에, 재도포 두께가 3nm일 때의 열처리가 진행된 금속나노입자의 변화하는 형상을 출력할 수 있다.

[0063] 도 6은 일 실시예에 의한 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 방법의 일 예를 도시한다.

[0064] 도 6을 참조하면, 사용자는 열처리 과정에서 금속나노입자의 형상 변화를 예측하기 위해 프로그램에 마련된 시뮬레이션 조건 입력부(110)에 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 입력할 수 있다(610). 사용자는 바닥재 형상(112)인 반지름을 입력할 수 있다. 사용자는 열처리전의 금속나노구조체의 도포두께(111), 금속나노입자의 표면에너지 및 금속나노입자와 바닥재의 계면에너지 사이의 비율(115)을 입력할 수 있다. 사용자는 열처리 시간(113)과 열처리 온도(114)를 입력할 수 있다.

[0065] 프로그램은 열처리 시뮬레이션 계산부(120)에 의하여, 시뮬레이션 조건 입력부(110)에 의해 입력된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보와 열처리 정보를 확인할 수 있다(620).

[0066] 프로그램은 열처리 시뮬레이션 계산부(120)에 의하여, 확인된 바닥재 정보와 금속나노입자 형성 정보에 기초하여 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산할 수 있다(630). 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 사용자가 입력한 바닥재 형상(112), 열처리전의 금속나노구조체의 도포두께(111), 금속나노입자의 표면에너지 및 금속나노입자와 바닥재의 계면에너지 사이의 비율(115)을 확인하여 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산할 수 있다.

[0067] 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식을 계산할 때에, 도포금속, 바닥재, 부피, 미소 부피, 금속나노입자의 화학적 잠재에너지, 금속나노입자의 표면에너지, 바닥재의 표면에너지, 금속나노입자와 바닥재의 계면에너지를 이용할 수 있다.

[0068] 프로그램은 열처리 시뮬레이션 계산부(120)에 의하여, 계산된 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식과 확인된 열처리 정보에 기초하여 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산할 수 있다(640). 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 계산한 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식과 열처리 온도(114)와 열처리 시간(113)을 확인하여 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산할 수 있다.

[0069] 열처리 시뮬레이션 계산부(120)는 금속나노입자가 변화하는 형상을 계산할 때에, 구배, 열처리 정보, 온도에 따른 금속나노입자의 이동성 함수, 금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식, 금속나노입자의 분포 정의 함수를 이용할 수 있다.

[0070] 프로그램은 시뮬레이션 결과 출력부(130)에 의하여, 계산된 금속나노입자가 변화하는 형상에 응답하여 열처리 과정의 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 출력할 수 있다(650). 시뮬레이션 결과 출력부(130)는 열처리 과정의 금속나노입자의 변화하는 형상 정보에 대한 예측 결과물을 ASCII 파일로 출력할 수 있다. 시뮬레이션 결과 출력부(130)는 예측 결과물을 3차원 이미지로 출력할 수 있다. 시뮬레이션 결과 출력부(130)는 예측 결과물을 3차원 이미지로 출력할 때에, 광학적 특성이 향상된 금속나노입자의 형상을 출력할 수 있다. 사용자는 예측 결과물에 대한 출력 간격을 설정할 수 있다.

[0071] 이상과 같이, 일 실시예에 따른 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치(100)는 컴퓨터 시뮬레이션을 이용하여 금속나노입자의 열처리 과정에서 형상의 변화를 시간에 따라 예측할 수 있다.

[0072] 또한, 일 실시예에 따른 열처리 과정에서의 금속나노입자의 형상 예측 장치(100)는 해당 나노입자를 제작할 수 있는 열처리 제작 공정 조건을 제공할 수 있다.

[0073] 한편, 개시된 실시예들은 컴퓨터에 의해 실행 가능한 명령어를 저장하는 기록 매체의 형태로 구현될 수 있다. 명령어는 프로그램 코드의 형태로 저장될 수 있으며, 프로세서에 의해 실행되었을 때, 프로그램 모듈을 생성하여 개시된 실시예들의 동작을 수행할 수 있다. 기록 매체는 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록 매체로 구현될 수 있다.

[0074] 컴퓨터가 읽을 수 있는 기록 매체로는 컴퓨터에 의하여 해독될 수 있는 명령어가 저장된 모든 종류의 기록 매체를 포함한다. 예를 들어, ROM(Read Only Memory), RAM(Random Access Memory), 자기 테이프, 자기 디스크, 플래시 메모리, 광 데이터 저장장치 등이 있을 수 있다.

[0075] 이상에서와 같이 첨부된 도면을 참조하여 개시된 실시예들을 설명하였다. 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고도, 개시된 실시예들과 다른 형태로 본 발명이 실시될 수 있음을 이해할 것이다. 개시된 실시예들은 예시적인 것이며, 한정적으로 해석되어서는 안 된다.

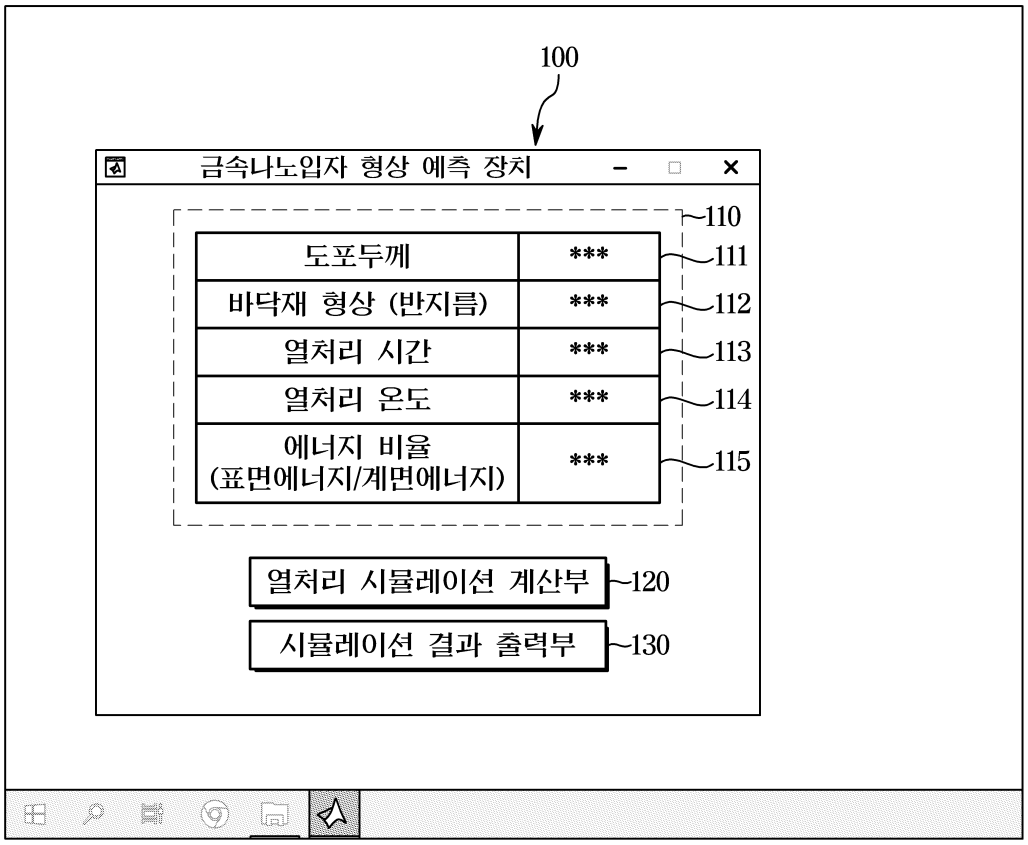
부호의 설명

[0076] 100: 금속나노입자의 형상 예측 장치 110: 시뮬레이션 조건 입력부

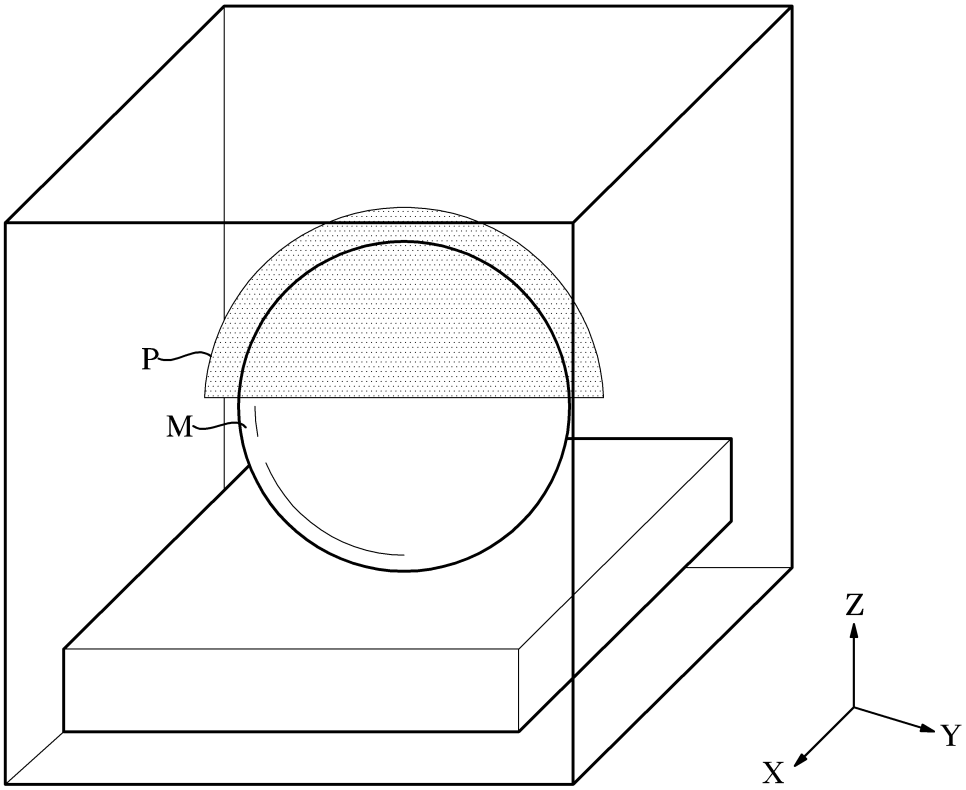
120: 열처리 시뮬레이션 계산부 130: 시뮬레이션 결과 출력부

도면

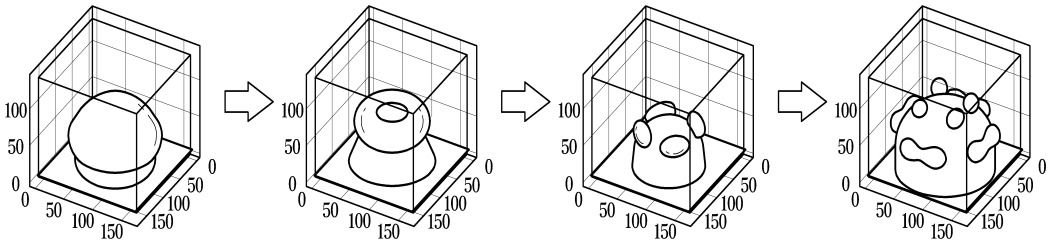
도면1



도면2

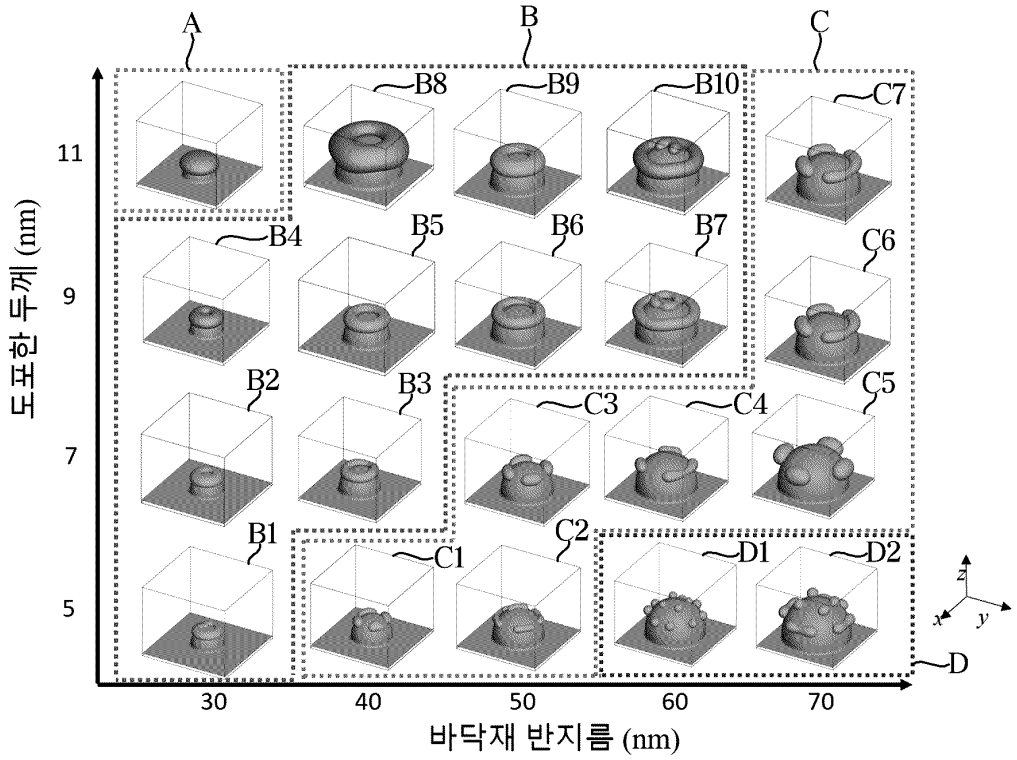


도면3

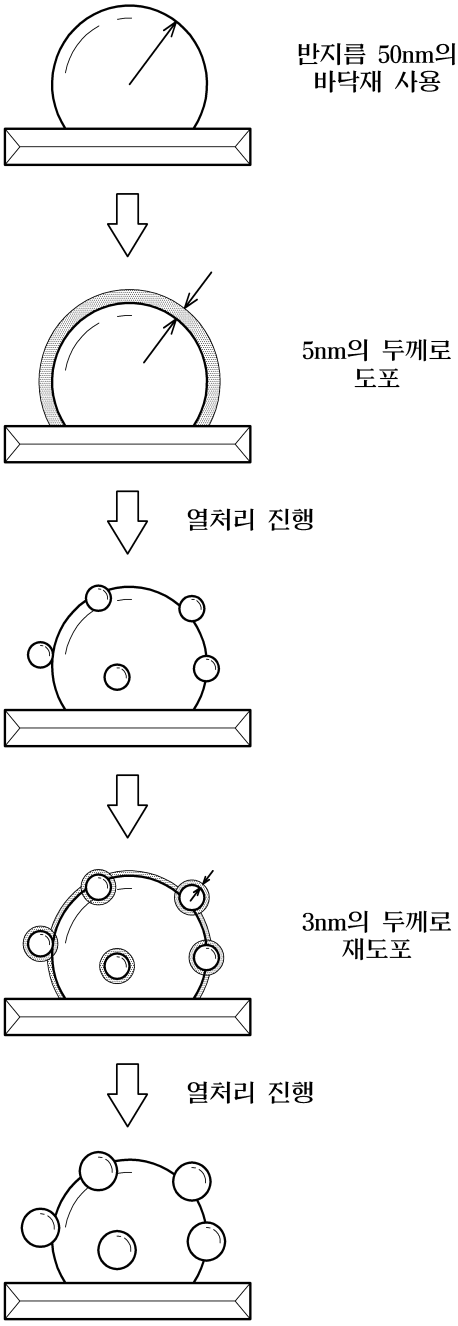


제 1 형상 정보 제 2 형상 정보 제 3 형상 정보 제 4 형상 정보

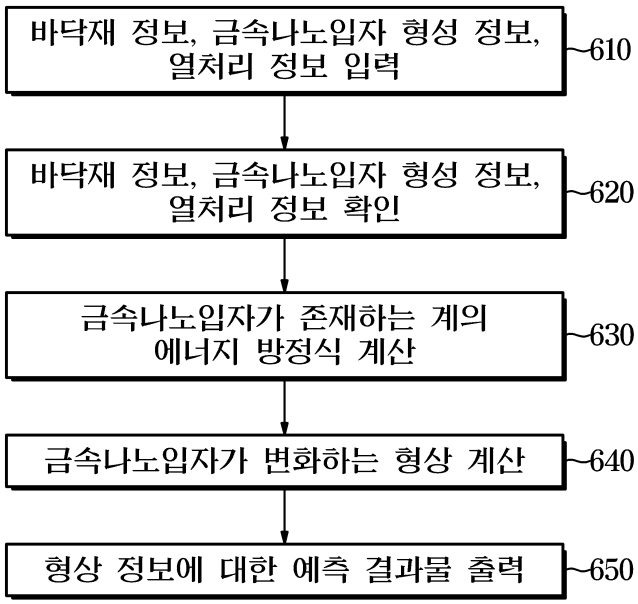
도면4


A
B
C
B8
B9
B10
C7
11
B4
B5
B6
B7
C6
9
B2
B3
C3
C4
C5
7
B1
C1
C2
D1
D2
5
D
30
40
50
60
70
도포한 두께 (nm)
바닥재 반지름 (nm)
z
x
y

도면5



도면6


바닥재 정보, 금속나노입자 형성 정보, 열처리 정보 입력
610
바닥재 정보, 금속나노입자 형성 정보, 열처리 정보 확인
620
금속나노입자가 존재하는 계의 에너지 방정식 계산
630
금속나노입자가 변화하는 형상 계산
640
형상 정보에 대한 예측 결과물 출력
650