

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2016 년 6 월 30 일 (30.06.2016)



(10) 국제공개번호
WO 2016/104995 A1

- (51) 국제특허분류:
G06F 19/00 (2011.01) *G01N 33/00* (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2015/013410
- (22) 국제출원일: 2015 년 12 월 8 일 (08.12.2015)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2014-0186680 2014 년 12 월 23 일 (23.12.2014) KR
- (71) 출원인: 주식회사 엘지화학 (LG CHEM, LTD.)
[KR/KR]; 07336 서울시 영등포구 여의대로 128, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 이승엽 (LEE, Seung-Yup); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 정지원 (JEONG, Ji-Won); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 김정훈 (KIM, Kyoung-Hoon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR).
- (74) 대리인: 이명구 (LEE, Myongku); 06296 서울시 강남구 논현로 38 길 12, 한양빌딩 6층, Seoul (KR).
- (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO,

AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

- (84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

규칙 4.17 에 의한 선언서:

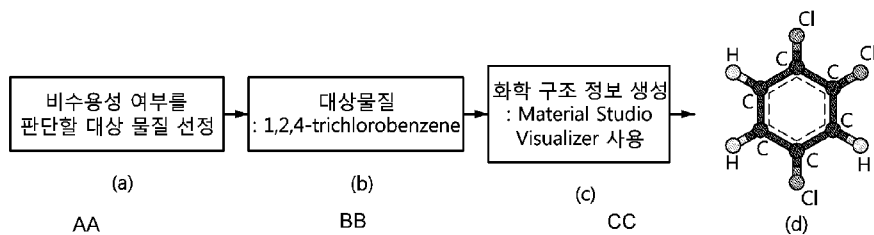
- 특허출원 및 특허를 받을 수 있는 출원인의 자격에 관한 선언 (규칙 4.17(ii))

공개:

- 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

(54) Title: WATER-INSOLUBLE MATERIAL EVALUATION METHOD AND WATER-INSOLUBLE MATERIAL EVALUATION

(54) 발명의 명칭 : 비수용성 물질 평가 방법 및 평가 시스템



AA ... Select target material of which water-insolubility is to be determined

BB ... Target material: 1,2,4-trichlorobenzene

CC ... Generate chemical structure information: using Material Studio Visualizer

(57) Abstract: The present invention provides a water-insoluble material evaluation method, capable of calculating the solubility parameter on the basis of chemical structure information of a material of which water insolubility is to be determined; finally determining the water-insolubility of the target material through established quantitative criteria; and determining the water insolubility of the target material even before the target material is actually synthesized.

(57) 요약서: 본 발명은 비수용성 여부를 판단하려는 물질의 화학구조 정보를 바탕으로 용해도 상수 (solubility parameter) 를 계산하고, 정립된 정량적인 기준을 통해 비수용성 여부를 최종적으로 판단하며, 대상 물질이 실제로 합성되기 전에도 비수용성인지 아닌지를 판단할 수 있는 비수용성 물질 평가방법을 제공한다.

WO 2016/104995 A1

명세서

발명의 명칭: 비수용성 물질 평가 방법 및 평가 시스템

기술분야

- [1] 본 출원은 2014년 12월 23일자 한국 특허 출원 제10-2014-0186680호에 기초한 우선권의 이익을 주장하며, 해당 한국 특허 출원의 문헌에 개시된 모든 내용은 본 명세서의 일부로서 포함된다.
- [2] 본 발명은 비수용성 물질 평가 방법 및 평가 시스템에 관한 것이다.

배경기술

- [3] 유기화합물의 여러 물성의 정확한 값을 구체적으로 아는 것은 그 물질의 용도의 타당성을 검토하거나 합성 및 정제 과정을 설계하고 보관, 운반, 사용, 폐기의 방법과 조건을 설정하는 등, 생산과 소비의 전 과정에 걸친 제반 의사결정 사항들에 결정적이기 때문에 산업적으로나 학문적으로 매우 중요한 문제이다. 관심 있는 유기화합물의 관심 있는 물성의 값을 가장 정확하게 알 수 있는 방법은 역시 실험이겠으나 정제된 시료의 준비, 정확한 측정을 위한 환경의 구축 등 여러 가지 측면에서 상당한 비용과 시간이 드는 것이 사실이며 경우에 따라서는 불가능할 수도 있다. 따라서, 그 대안으로 오래전부터 많은 연구자들이 유기화합물의 여러 물성의 정확한 값을 예측하고자 노력을 기울여 왔다. 이처럼 물성 예측은 오랜 역사를 가지며 끊임없이 새로운 예측 방법들이 등장하여 현재는 물성별로 정확도와 적용범위 등이 서로 다른 여러 예측 모형들이 공존하고 있는 상황이다.
- [4] 한편, 용액을 사용하는 공정을 바탕으로 한 신소재 개발 및 분리 방법 개발에서는 대상 물질인 용질이 물에 대해 용해되지 않는 특성인 비수용성인지 아닌지를 정확하게 판단하는 것은 매우 중요하다.
- [5] 이와 같이, 비수용성 여부가 중요한 이유는 용액을 구성하는데 가장 빈번하게 사용되는 용매가 바로 물이기 때문이다. 또한 물에 잘 용해되는 수용성 물질은 외부에 배출되었을 경우 물과 분리가 잘 되지 않아 환경적인 문제를 발생시킬 수 있기 때문에 대상 물질의 비수용성 여부를 정확하게 판단해야 할 필요가 있다.
- [6] 현재까지, 비수용성 물질 여부를 판단하기 위해서 사용되고 있는 방법은 대상 물질을 직접 물에 용해시키는 용해도 실험을 수행하는 것이다. 하지만 소재 개발에서 테스트되는 수많은 물질들에 대해 용해도 실험을 수행해서 비수용성 여부를 판단하는 것은 시간 및 비용적인 한계로 인해 불가능하다는 문제가 있다.
- [7] 특히 대상 물질이 고가인 경우에 단지 비수용성 여부를 판단하기 위해 많은 양을 소모해야 하는 용해도 실험을 수행하는 것은 어려운 문제가 있다. 이뿐만 아니라, 현재의 실험 방법을 사용하기 위해서는 대상 물질이 반드시 실제로 합성이 되어 있어야 한다는 문제도 있다. 즉, 대상 물질이 합성되기 전에는 실험 방법을 적용할 수 없기 때문에 비수용성 여부를 전혀 판단할 수 없다는 문제가

있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

[8] 상기의 문제점을 해결하기 위해서 본 발명은 대상 물질의 비수용성 여부를 실제 실험의 수행 없이도 정량적으로 명확하게 판단할 수 있는 새로운 방법인 비수용성 물질 평가방법을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[9] 본 발명은 비수용성 여부를 판단하려는 물질의 화학구조 정보를 바탕으로 용해도 상수(solubility parameter)를 계산하고, 정립된 정량적인 기준을 통해 비수용성 여부를 최종적으로 판단하는 비수용성 물질 평가방법을 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

[10] 상기 목적을 달성하기 위해서, 본 발명은 (1) N개의 대상물질들을 선정하여, 상기 대상물질들의 화학 구조 정보를 생성하는 단계; (2) 상기 생성된 화학 구조 정보를 이용하여 비극성 용해도 상수(D), 극성 용해도 상수(P) 및 수소결합 용해도 상수(H)를 계산하는 단계; (3) 하기 수학식 1 및 하기 수학식 2로 상기 대상물질들의 비수용성 특성값을 계산하는 단계; 및 (4) 상기 계산된 대상물질들의 비수용성 특성값을 정량적 기준으로 평가하는 단계;를 포함할 수 있다.

[11] [수학식 1]

$$GIWiS_1[X_i] = \frac{8.7xD^{1.2} + 0.45xP^{0.8}xH^{0.4}}{\epsilon_x}$$

[13] [수학식 2]

$$GIWiS_2[X_i] = \frac{\sqrt{1.2xP^2 + 0.8xH^2}}{MagT}$$

[15] 상기 수학식 1의 ϵ_x 는 0보다 큰 실수 값이고, 상기 수학식 2의 $MagT = \sqrt{D^2 + P^2 + H^2}$ 이며, 상기 수학식 1 및 수학식 2의 D는 비극성 용해도

상수, P는 극성 용해도 상수 및 H는 수소결합 용해도 상수이고, X_i 는 i번째 대상물질이고, i는 1 내지 N의 자연수이며, N은 자연수이다.

[16] 본 발명의 다른 태양은 본 발명의 비수용성 물질 평가방법을 적용한 모듈을 포함하는 비수용성 물질 평가시스템을 제공한다.

[17] 또한, 본 발명의 또 다른 태양은 본 발명의 비수용성 물질 평가방법을 실행하기 위한 프로그램이 기록된 컴퓨터에서 판독 가능한 기록 매체를 제공한다.

발명의 효과

- [18] 본 발명은 대상 물질의 비수용성 여부를 실제 실험의 수행 없이도 정량적으로 명확하게 판단할 수 있는 비수용성 물질 평가방법을 제공한다.
- [19] 특히 본 발명에서 제공하는 비수용성 물질 평가방법은 대상 물질이 실제로 합성되기 전에도 비수용성인지 아닌지를 판단할 수 있다.
- [20] 나아가, 비수용성 물질을 실제 실험을 수행하지 않고도 명확하게 평가하는 본 발명은, 향후 용액공정을 이용한 소재 개발 및 관련 공정 문제점 해결과 효과적인 분리공정을 개발에 매우 유용하게 사용될 것으로 기대된다.

도면의 간단한 설명

- [21] 도 1은 본 발명의 비수용성 여부를 판단할 대상 물질들을 선정하여 각 대상물질들의 화학 구조 정보를 생성하는 단계의 일실시예의 순서도이다.

발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [22] 이하, 본 발명을 상세하게 설명한다. 하기의 구체적 설명은 본 발명의 일 실시예에 대한 설명이므로, 비록 한정적 표현이 있더라도 특허청구범위로부터 정해지는 권리범위를 제한하는 것은 아니다.
- [23] 본 발명에서 비수용성 물질은 용질로서 용매인 물에 용해되지 않는 물질을 의미한다.
- [24] 종래에는 비수용성 물질 여부를 판단하기 위해서 사용되고 있는 방법은 대상 물질을 직접 물에 용해시키는 용해성 실험을 수행하는 것이다. 하지만 소재 개발에서 테스트되는 수많은 물질들에 대해 용해성 실험을 수행해서 비수용성 여부를 판단하는 것은 시간 및 비용적인 한계로 인해 불가능하다는 문제가 있다.
- [25] 이에 본 발명자들은 예의 노력한 바, 직접 대상물질을 합성하여 용해도 실험을 수행하지 않더라도 비수용성 물질 여부를 판단할 수 있는 방법을 발견하여 본 발명을 완성하게 되었다.
- [26] 본 발명은 GIWiS(Gaugeable Indicator of Water-insoluble Signal)에 관한 것이다. 구체적으로 설명하면, 상기 GIWiS방법은 비수용성 여부를 판단하려는 물질의 화학구조 정보를 바탕으로 용해도 상수(solubility parameter)를 이용해서 정립된 정량적인 기준을 통해 비수용성 여부를 최종적으로 판단한다.
- [27] 즉, 본 발명은 (1) N개의 대상물질들을 선정하여, 상기 대상물질들의 화학 구조 정보를 생성하는 단계; (2) 상기 생성된 화학 구조 정보를 이용하여 비극성 용해도 상수(D), 극성 용해도 상수(P) 및 수소결합 용해도 상수(H)를 계산하는 단계; (3) 하기 수학식 1 및 하기 수학식 2로 대상물질의 비수용성 특성값을 계산하는 단계; 및 (4) 상기 계산된 비수용성 특성값을 정량적 기준으로 평가하는 단계;를 포함할 수 있다.
- [28] [수학식 1]

[29]

$$GIWiS_1[X_i] = \frac{8.7 \times D^{1.2} + 0.45 \times P^{0.8} \times H^{0.4}}{\epsilon_x}$$

[30] [수학식 2]

[31]

$$GIWiS_2[X_i] = \frac{\sqrt{1.2 \times P^2 + 0.8 \times H^2}}{\text{MagT}}$$

[32] 상기 수학식 1의 ϵ_x 는 0보다 큰 실수 값이고, 상기 수학식 2의
이며, 상기 수학식 1 및 수학식 2의 D는 비극성 용해도

$$\text{MagT} = \sqrt{D^2 + P^2 + H^2}$$

상수, P는 극성 용해도 상수 및 H는 수소결합 용해도 상수이고, X_i 는 i번째 대상물질이고, i는 1 내지 N의 자연수이며, N은 자연수이다.

[33] 이하 본 발명의 비수용성 물질 평가방법에 대해 설명한다.

[34] 먼저 (1) 단계에 대해 설명한다.

[35] 본 단계에서는 비수용성 여부를 판단할 대상 물질들을 선정하여 각 대상물질들의 화학 구조 정보를 생성하는 단계이다. 즉, 물에 대해서 용해되지 않는 특성인 비수용성 여부를 판단할 대상 물질 N개를 선정하고, 선정된 N개의 대상 물질에 대한 화학 구조 정보를 생성한다. 상기 화학 구조 정보는 각각의 대상 물질들이 구성하는 원자 및 분자 사이의 화학 결합에 대한 정보를 나타낸다.

[36] 본 발명의 바람직한 일실시예에 따르면, 상기 (1)단계에서 대상물질의 개수는 자연수이면 무관하다. 즉, 평가할 대상 물질의 개수는 몇 개라도 상관없이 수행가능하며, 예를 들어, N이 100 내지 1000이어도, 모두 수행 가능하다.

[37] 그리고 상기 화학 구조 정보는 통상적으로 사용 가능한 프로그램을 사용해서 생성할 수 있으나, 바람직하게는 Accelrys사에서 개발한 Material Studio Visualizer 프로그램을 사용할 수 있다.

[38] 도 1은 본 발명의 바람직한 일실시예로, 상기 (1)단계의 순서를 나타낸 순서도이다. 즉, (a) 비수용성 여부를 판단할 대상 물질로 (b) 1,2,4-trichlorobenzene을 선정하면, (c) 상기 대상 물질의 화학 구조 정보를 Material Studio Visualizer를 사용해서 생성한다. 프로그램에 의해 생성된 화학 구조에서 (d) C로 나타낸 것은 방향족 링(aromatic ring)을 구성해 벤젠(benzene)을 구성하는 탄소 원자(carbon atom)를 나타내고, Cl로 및 H로 나타낸 것은 각각 염소 원자(chlorine atom) 및 수소 원자(hydrogen atom)를 나타낸다.

[39] 다음 (2) 단계에 대해 설명한다.

[40] 본 단계에서는 생성된 화학 구조를 이용한 용해도 상수 계산한다. 즉, N개의 대상 물질들에 대해 생성된 화학 구조 정보를 바탕으로 각각의 대상 물질들의

용해도 상수 (solubility parameter)를 계산한다.

- [41] 본 발명에서 계산을 통해 얻을 수 있는 용해도 상수 (solubility parameter)는 특성에 따라 3가지로 나누어질 수 있다. 첫번째로, 비극성(nonpolar) 특성으로 인한 비극성 용해도 상수 (Nonpolar dispersion solubility parameter, D), 두번째로는 극성(polar) 특성으로 인한 극성 용해도 상수(Polar solubility parameter, P) 그리고 세번째로 수소 결합 특성으로 인한 수소 결합 용해도 상수(Hydrogen bonding solubility parameter, H)로 나누어질 수 있다.

- [42] 상기 용해도 상수를 계산할 수 있는 방법은 통상적으로 사용 가능한 프로그램이면 무엇이든 가능하나, 바람직하게는 C.M. Hansen이 개발한 HSPiP (Hansen Solubility Parameters in Practice) 프로그램을 사용해서 용해도 상수를 계산할 수 있다.

- [43] 다음 (3) 단계에 대해 설명한다.

- [44] 본 단계에서는 상기 대상 물질들에 대한 비수용성 특성값을 계산한다. 즉, N개의 대상 물질들 중에서 i번째 물질(X_i)에 대해 상기 (2)단계에서 계산한 3개의 용해도 상수를 이용해서 하기의 수학식 1 및 수학식 2에 나타낸 식으로 정의된 비수용성 특성값인 $GIWiS_1[X_i]$ 와 $GIWiS_2[X_i]$ 를 계산한다. 상기 i는 1 내지 N의 정수이다.

- [45] [수학식 1]

[46]

$$GIWiS_1[X_i] = \frac{8.7xD^{1.2} + 0.45xP^{0.8}xH^{0.4}}{\epsilon_x}$$

- [47] [수학식 2]

[48]

$$GIWiS_2[X_i] = \frac{\sqrt{1.2xP^2 + 0.8xH^2}}{MagT}$$

- [49] 상기 수학식 1의 ϵ_x 는 0보다 큰 실수이고, 상기 수학식 2의 $MagT$ 이며, 상기 수학식 1 및 수학식 2의 D는 비극성 용해도

$$MagT = \sqrt{D^2 + P^2 + H^2}$$

상수, P는 극성 용해도 상수 및 H는 수소결합 용해도 상수이고, X_i 는 i번째 대상물질이고, i는 1 내지 N의 자연수이며, N은 자연수이다.

- [50] 그리고 본 발명의 바람직한 일실시예에 따르면, 상기 ϵ_x 는 환산계수(scaling factor)로 0이 아닌 실수 값인 경우 특별한 제한은 없지만, 바람직하게는 0.01 ~ 332.5의 실수일 수 있고, 가장 바람직하게는 242.2일 수 있다. 본 발명의 상기 수학식 1 및 수학식 2는 상기 환산계수(ϵ_x)를 통해서 값의 크기를 조절할 수 있다.

- [51] 다음 (4) 단계에 대해 설명한다.

- [52] 본 단계는 상기 (3)단계에서 계산된 비수용성 특성값을 정량적 기준을 통한

대상물질들의 비수용성 여부를 평가하는 것이다. 즉, N개의 대상 물질들의 비수용성 여부를 정립된 2개의 정량적 기준 1과 정량적 기준 2를 사용하여 평가하여 최종 판단한다.

- [53] 구체적으로 설명하면, 비수용성 여부에 대한 평가 과정은 하기에 나타난 것과 같이 두가지 단계로 수행될 수 있다. 첫번째 단계로 N개의 대상 물질 가운데 i번째 대상물질(X_i)에 대해 계산된 $GIWiS_1[X_i]$ 와 $GIWiS_2[X_i]$ 가 하기에 나타난 정량적 조건 1을 만족시키는지 여부를 평가한다. 단, i는 1내지 N의 정수이다.
- [54] 상기 정량적 조건 1은 $0.90 < GIWiS_1[X_i]$ 이고, $GIWiS_2[X_i] < 47.3$ 인 것을 의미하며, 이를 만족시키는지를 평가한다. 만약, 상기 i번째 대상물질(X_i)이 상기 정량적 조건 1을 만족시키면, 상기 i번째 대상물질(X_i)은 비수용성 물질로 판단한다.
- [55] 그리고 본 발명의 바람직한 일실시예에 따르면, 상기 i번째 대상물질(X_i)이 정량적 조건 1을 만족시키면, $i < N$ 일 때, $i+1$ 번째 대상 물질(X_{i+1})이 정량적 조건 1을 만족시키는지를 평가한다. 그리고 계속 이와 같이 반복하여 평가하다가, $i = N$ 이 되면, N개의 대상 물질들에 대해서 비수용성 여부 판단을 모두 마쳤기 때문에 평가 단계를 종료한다.
- [56] 한편, 상기 i번째 대상물질(X_i)이 상기 정량적 조건 1을 만족시키지 않는 경우, 다음 두번째 단계로 평가한다. 본 발명의 바람직한 일실시예에 따르면, 상기 정량적 조건 1을 만족시키지 않으면, N개의 대상 물질 가운데 i번째 대상물질(X_i)에 대해 계산된 $GIWiS_1[X_i]$ 와 $GIWiS_2[X_i]$ 가 하기에 나타난 정량적 조건 2를 만족시키는지 여부를 평가한다. i는 1 내지 N의 정수이다.
- [57] 상기 정량적 조건 2는 $1.03 < GIWiS_1[X_i]$ 이고, $GIWiS_2[X_i] < 53.1$ 인 것을 의미하며, 이를 만족시키는지 여부를 평가한다. 만약, 상기 i번째 대상물질(X_i)이 상기 정량적 조건 2를 만족시키면, 대상물질(X_i)은 비수용성 물질로 판단한다. 그리고 본 발명의 바람직한 일실시예에 따르면, 상기 대상물질(X_i)이 정량적 조건 2를 만족시키면, $i < N$ 일 때, $i+1$ 번째 대상 물질(X_{i+1})을 상기 정량적 조건 1을 만족시키는지를 평가한다. 즉, i번째 대상물질(X_i)이 정량적 조건 2를 만족하여, 비수용성 물질이므로, 다음 대상물질의 비수용성 물질 평가를 수행한다. 이와 같이 반복하여 평가하다가, $i = N$ 일 때에는, N개의 대상 물질에 대해서 비수용성 여부 판단을 모두 마쳤기 때문에 평가 단계를 종료한다.
- [58] 한편, 상기 i번째 대상물질(X_i)이 정량적 조건 2를 만족시키지 않으면, 상기 i번째 대상물질(X_i)은 비수용성 물질이 아니다. 그리고 다음으로, $i < N$ 일 때에는, $i+1$ 번째 대상 물질(X_{i+1})을 상기 정량적 조건 1을 만족시키는지를 평가한다. 즉, i번째 대상물질(X_i)이 정량적 조건 2를 만족하지 않아도, 계속해서 다음 대상물질의 비수용성 물질 평가를 수행한다. 이와 같이 반복하여 평가하다가, $i = N$ 일 때에는, N개의 대상 물질에 대해서 비수용성 여부 판단을 모두 마쳤기 때문에 평가단계를 종료한다.
- [59] 결론적으로, 본 발명의 상기 i번째 대상물질(X_i)이 상기 정량적 조건 1 및 상기

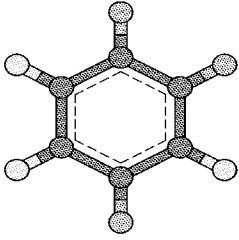
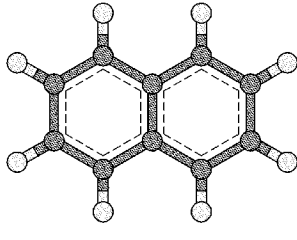
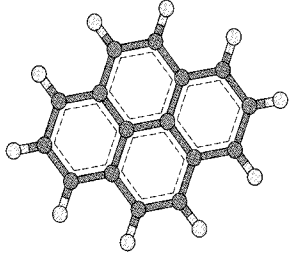
정량적 조건 2 모두를 만족시키지 않는 경우에는 i 번째 대상물질(X_i)은 비수용성 물질로 판단하지 않는다. 그리고 상기 정량적 조건 2는 정량적조건 1이 놓칠 수 있는 비수용성 물질을 찾을 수 있다. 따라서, 상기 정량적 조건 1 및 정량적 조건 2는 서로 보완을 해주는 관계이다.

- [60] 이와 같이 본 발명에서 제공하는 비수용성 물질 평가방법은 기존에 알려진 비수용성 물질에 대해 적용해 본 결과 비수용성 여부를 정확하게 평가하는 것을 확인해서 본 발명의 효용성을 확보하였다.
- [61] 본 명세서에서는 본 발명의 비수용성 물질 평가방법을 적용한 모듈을 포함하는 비수용성 물질 평가시스템을 제공한다.
- [62] 상기 비수용성 물질 평가시스템에 있어서 비수용성 물질 평가방법과 중복되는 구성에 대한 설명은 동일하다.
- [63] 또한, 본 발명에서 모듈(module)이란 용어는 특정한 기능이나 동작을 처리하는 하나의 단위를 의미하며, 이는 하드웨어나 소프트웨어 또는 하드웨어 및 소프트웨어의 결합으로 구현할 수 있다.
- [64] 본 발명의 또 다른 태양은 본 발명의 비수용성 물질 평가방법을 실행하기 위한 프로그램이 기록된 컴퓨터에서 판독 가능한 기록 매체를 제공한다.

발명의 실시를 위한 형태

- [65] 이하 본 발명을 실시예에 기초하여 더욱 상세하게 설명하지만, 하기에 개시되는 본 발명의 실시 형태는 어디까지 예시으로써, 본 발명의 범위는 이들의 실시 형태에 한정되지 않는다. 본 발명의 범위는 특허청구범위에 표시되었고, 더욱이 특허 청구범위 기록과 균등한 의미 및 범위 내에서의 모든 변경을 함유하고 있다. 또한, 이하의 실시예, 비교예에서 함유량을 나타내는 "%" 및 "부"는 특별히 언급하지 않는 한 중량 기준이다.
- [66] 실시예
- [67] (1) 비수용성 여부를 판단할 대상 물질의 선정 및 화학 구조 정보를 생성
- [68] ; 비수용성 여부를 판단할 대상 물질(X_i)로 하기에 나타낸 총 3종($N=3$)을 물질을 선정하였다($i=1$ 내지 N). 그리고, 상기 총 3종의 물질의 화학 구조 정보를 Accelrys사에서 개발한 Material Studio Visualizer 프로그램을 사용해서 생성하였다. 그리고 하기 표 1에 3종 대상 물질(X_i)과 각각의 대상 물질에 대해 생성된 화학 구조 정보를 나타내었다.

[69] [표1]

대상물질 (X_i)	X_1	X_2	X_3
화합물 명칭	1,2,4-trichlorobenzene	Bicyclo[4.4.0]deca-1,3, 5,7,9-pentene	Pyrene
화학구조 정보			

[70] (2) 생성된 화학 구조를 이용한 용해도 상수 계산

[71] ; 3종 대상 물질에 대해 생성된 화학 구조 정보를 바탕으로 용해도 상수(solubility parameter)를 계산하였다. 본 실시예에서 용해도 계산은 HSPiP(Hansen Solubility Parameters in Practice)를 이용해서 수행하였다. 이를 통해 각각의 대상 물질에 대해 3가지 서로 다른 특성을 나타내는 용해도 상수인 비극성 용해도 상수(nonpolar dispersion solubility parameter), 극성 용해도 상수(polar solubility parameter), 수소결합 용해도 상수(hydrogen bonding solubility parameter)를 계산하여, 각각의 대상 물질에 대해 계산된 용해도 값을 하기의 표 2에 나타냄.

[72] [표2]

대상물질 (X_i)	비극성 용해도 상수 (D)	극성 용해도 상수 (P)	수소 결합 용해도 상수 (H)
1,2,4-trichlorobenzene	20.2	4.2	3.2
Bicyclo[4.4.0]deca-1,3,5,7,9- pentene	19.2	2.0	5.9
Pyrene	22.7	3.6	3.7

[73] (3) 대상 물질에 대한 비수용성 특성값 계산

[74] ; 총 3개의 각각의 대상 물질(X_i)에 대해 상기 (2)단계의 과정을 통해 계산된 3개의 용해도 상수를 이용해서 하기에 표시된 수학적 1 및 수학적 2로 정의된 비수용성 특성인 GIWiS₁과 GIWiS₂를 계산하였다.

[75] [수학적 1]

[76]

$$GIWiS_1[X_i] = \frac{8.7xD^{1.2} + 0.45xP^{0.8}xH^{0.4}}{\epsilon_x}$$

[77] [수학식 2]

[78]

$$GIWiS_2[X_i] = \frac{\sqrt{1.2xP^2 + 0.8xH^2}}{MagT}$$

[79] 상기 수학식 1의 ϵ_x 는 ϵ_x 는 242.2로 설정해서 사용하였고, 상기 수학식 2의 $MagT = \sqrt{D^2 + P^2 + H^2}$ 이며, 상기 수학식 1 및 수학식 2의 D는 비극성 용해도

$$MagT = \sqrt{D^2 + P^2 + H^2}$$

상수, P는 극성 용해도 상수 및 H는 수소결합 용해도 상수이고, X_i 는 i번째 대상물질이고, i는 1 내지 N의 자연수이며, N은 3이다. 그리고 계산하여 표 3에 나타내었다.

[80] [표3]

대상물질 (X_i)	$GIWiS_1(X_i)$	$GIWiS_2(X_i)$
1,2,4-trichlorobenzene	1.33	26.0
Bicyclo[4.4.0]deca-1,3,5,7,9-pentene	1.25	28.3
Pyrene	1.53	22.1

[81] (4) 정량적 기준을 통한 대상물질의 비수용성 여부 평가

[82] ; 3개의 대상 물질의 비수용성 여부를 정립된 2개의 정량적 기준 1과 정량적 기준 2를 사용한 평가를 통해 최종 판단하였다.

[83] - 정량적 조건 1: $GIWiS_1[X_i] > 0.90$ 인 동시에 $GIWiS_2[X_i] < 47.3$

[84] - 정량적 조건 2: $GIWiS_1[X_i] > 1.03$ 인 동시에 $GIWiS_2[X_i] < 53.1$

[85] 상기 정량적 조건 1 및 정량적 조건 2에 대한 평가를 통해 최종적으로 판단된 비수용성 여부에 대한 결과는 표 4에 나타내었다.

[86] [표4]

대상물질 (X_i)	비수용성판단결과	판단근거
1,2,4-trichlorobenzene	비수용성	정량적 조건 1 만족
Bicyclo[4.4.0]deca-1,3,5,7,9-pentene	비수용성	정량적 조건 1 만족
Pyrene	비수용성	정량적 조건 1 만족

[87] 표 4를 설명하면, 1,2,4-trichlorobenzene(X_1)는 $GIWiS_1[X_1]=1.33$ 이고, $GIWiS_2[X_1]=26.0$ 으로 정량적 조건 1을 만족시키므로, 비수용성 물질로 최종 판단되었다.

[88] 그리고 Bicyclo[4.4.0]deca-1,3,5,7,9-pentene(X_2)도 $GIWiS_1[X_2]=1.25$ 이고, $GIWiS_2$

[X₂]=28.3으로 정량적 조건 1을 만족시키므로, 비수용성 물질로 최종 판단되었다. 또한, Pyrene(X₃) 역시, GIWiS₁[X₃]=1.53이고, GIWiS₂[X₃]=22.1로 정량적 조건 1을 만족시킴으로써, 비수용성 물질로 최종 판단되었다.

[89] **비교예**

[90] 2-부탄올(2-Butanol)을 대상 물질(X₄)로 정하여, (1) 화학 구조 정보 생성 및 (2) 용해도 상수 계산은 상기 실시예와 동일하게 실시하였다. 계산된 상기 대상 물질(X₄)인 2-부탄올(2-Butanol)의 비극성 용해도 상수, 극성 용해도 상수 및 수소 결합 용해도 상수는 각각 15.8, 5.7 및 14.5이었다.

[91] 그리고 대상 물질(X₄)인 2-부탄올(2-Butanol)의 (3) 비수용성 특성값 계산도 상기 실시예와 동일하게 실시하였다.

[92] 마지막으로 대상 물질(X₄)인 2-부탄올(2-Butanol)의 (4) 비수용성 여부 평가도 상기 실시예와 동일하게 실시하였다.

[93] 그 결과, 대상 물질(X₄)인 2-부탄올(2-Butanol)은 GIWiS₁[X₄]=1.01이고, GIWiS₂[X₄]=64.9로 정량적 조건 1 및 정량적 조건 2를 모두 만족시키지 못하였다.

[94] 따라서 대상 물질(X₄)인 2-부탄올(2-Butanol)은 비수용성 물질이 아닌 것으로 최종 판단되었다.

[95] **실험예**

[96] 상기 실시예 및 비교예에서의 실시한 본 발명의 비수용성 평가방법의 타당성을 확인하기 위해 하기의 방법으로 확인하였다.

[97] 상기 4종 대상물질(X₁, X₂, X₃ 및 X₄)를 1 기압 및 25°C에서 각각 100g의 물에 24시간 용해시켜 용해도를 측정하였다.

[98] 그 결과 실시예 대상물질인 3종(X₁, X₂ 및 X₃)은 모두 0.005g 이하로 용해되어 물에 대한 용해도가 0에 매우 가까운 값을 나타내는 것으로 확인하였다. 반면에, 비교예의 대상물질(X₄)은 30g이 용해되어, 물에 대한 용해도가 매우 크다는 것을 확인하였다.

[99] 따라서 실시예의 3종 대상물질은 모두 비수용성 물질로 확인되었으며, 비교예의 1종의 대상물질은 비수용성 물질이 아닌 것으로 확인되었다.

[100] 결론적으로, 본 발명의 GIWiS를 이용한 비수용성 평가방법은 실제적인 용해도 측정 실험 없이도, 비수용성 물질을 정확하게 판단할 수 있다는 것을 알 수 있다.

청구범위

- [청구항 1] (1) N개의 대상물질들을 선정하여, 상기 대상물질들의 화학 구조 정보를 생성하는 단계;
 (2) 상기 생성된 화학 구조 정보를 이용하여 상기 대상물질들의 비극성 용해도 상수(D), 극성 용해도 상수(P) 및 수소결합 용해도 상수(H)를 계산하는 단계;
 (3) 하기 수학식 1 및 하기 수학식 2로 상기 대상물질들의 비수용성 특성값을 계산하는 단계; 및
 (4) 상기 계산된 대상물질들의 비수용성 특성값을 정량적 기준으로 평가하는 단계;를 포함하는 비수용성 물질 평가방법;
 [수학식 1]

$$GIWiS_1[X_i] = \frac{8.7 \times D^{1.2} + 0.45 \times P^{0.8} \times H^{0.4}}{\epsilon_x}$$

[수학식 2]

$$GIWiS_2[X_i] = \frac{\sqrt{1.2 \times P^2 + 0.8 \times H^2}}{MagT}$$

상기 수학식 1의 ϵ_x 는 0보다 큰 실수이고,
 상기 수학식 2의

$$MagT = \sqrt{D^2 + P^2 + H^2}$$

상기 수학식 1 및 수학식 2의 D는 비극성 용해도 상수, P는 극성 용해도 상수 및 H는 수소결합 용해도 상수이고, X_i 는 i번째 대상물질이고, i는 1 내지 N의 자연수이며, N은 자연수이다.

- [청구항 2] 청구항 1에 있어서,
 상기 (3)단계에서 상기 수학식 1의 ϵ_x 는 0.1 ~ 332.5의 실수인 것을 특징으로 하는 비수용성 물질 평가방법.

- [청구항 3] 청구항 1에 있어서,
 상기 (4)단계는
 상기 i번째 대상물질(X_i)이
 $0.9 < GIWiS_1[X_i]$ 이고, $GIWiS_2[X_i] < 47.3$ 인 정량적 조건 1을 만족시키는 경우, 비수용성 물질로 판단하는 것을 특징으로 하는 비수용성 물질 평가방법.

- [청구항 4] 청구항 3에 있어서,
 상기 i번째 대상물질(X_i)이 상기 정량적 조건 1을 만족시키면,
 $i < N$ 일 때,

$i+1$ 번째 대상물질(X_{i+1})이 상기 정량적 조건 1을 만족시키는지 평가하고,
 $i = N$ 일 때는, 평가 단계를 종료하는 것을 특징으로 하는 비수용성 물질
 평가방법.

[청구항 5] 청구항 3에 있어서,
 상기 i 번째 대상물질(X_i)이 상기 정량적 조건 1를 만족시키지 않으면,
 $1.03 < GIWiS_1[X_i]$ 이고, $GIWiS_2[X_i] < 53.1$ 인 정량적 조건 2를 만족시키는
 경우, 비수용성 물질로 판단하는 것을 특징으로 하는 비수용성 물질
 평가방법.

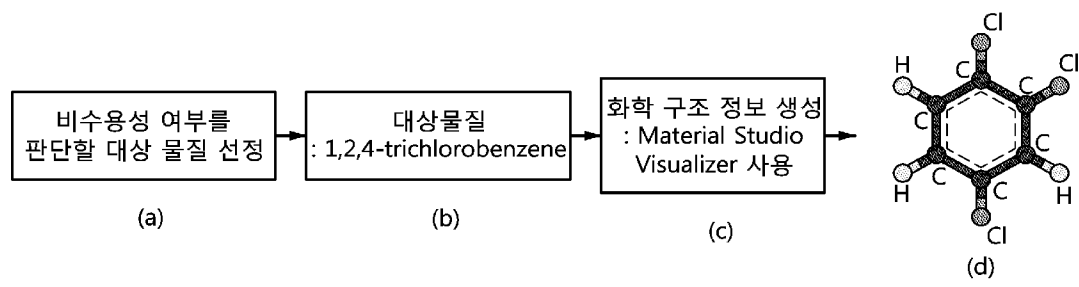
[청구항 6] 청구항 5에 있어서,
 상기 i 번째 대상물질(X_i)이 상기 정량적 조건 2을 만족시키거나
 만족시키지 않으면, $i < N$ 일 때,
 $i+1$ 번째 대상물질(X_{i+1})이 정량적 조건 1을 만족시키는지 평가하고,
 $i = N$ 일 때는, 평가 단계를 종료하는 것을 특징으로 하는 비수용성 물질
 평가방법.

[청구항 7] 청구항 1에 있어서,
 상기 (2)단계는 HSPiP(Hansen Solubility Parameters in Practice) 프로그램을
 사용하여 계산하는 것을 특징으로 하는 비수용성 물질 평가방법.

[청구항 8] 청구항 1의 비수용성 물질 평가방법을 적용한 모듈을 포함하는 비수용성
 물질 평가시스템.

[청구항 9] 청구항 1의 비수용성 물질 평가방법을 실행하기 위한 프로그램이 기록된
 컴퓨터에서 판독 가능한 기록 매체.

[도1]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2015/013410**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER****G06F 19/00(2011.01)i, G01N 33/00(2006.01)i**

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G06F 19/00; G01N 15/06; B30B 15/30; G01N 33/00; B23P 11/00; G01N 37/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

eKOMPASS (KIPO internal) & Keywords: insoluble, evaluation, polar solubility parameter,, nonpolar dispersion solubility parameter, hydrogen bonding solubility parameter

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	US 2006-0144171 A1 (CARLSON, Eric D. et al.) 06 July 2006 See paragraphs [0058]-[0068] and figure 1.	1-9
A	US 2010-0229636 A1 (LEVIN, Galit et al.) 16 September 2010 See paragraphs [0070]-[0077] and figures 1, 2	1-9
A	US 2011-0120239 A1 (FETVEDT, Jeremy) 26 May 2011 See paragraphs [0019]-[0027] and figures 1, 2.	1-9
A	US 2009-0165578 A1 (ZAMLOOT, Michael et al.) 02 July 2009 See paragraphs [0031]-[0039] and figures 1-4.	1-9
A	US 2006-0260422 A1 (SEKIZAWA, Kazutoshi et al.) 23 November 2006 See paragraphs [0070]-[0112] and figures 1-3.	1-9



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date

“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

18 MARCH 2016 (18.03.2016)

Date of mailing of the international search report

21 MARCH 2016 (21.03.2016)

Name and mailing address of the ISA/KR

Korean Intellectual Property Office
Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701,
Republic of Korea

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2015/013410

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
US 2006-0144171 A1	06/07/2006	US 2004-0168529 A1 US 7024955 B2 US 7234365 B2 WO 2004-078131 A2 WO 2004-078131 A3 WO 2004-079338 A2 WO 2004-079338 A3	02/09/2004 11/04/2006 26/06/2007 16/09/2004 20/01/2005 16/09/2004 29/12/2004
US 2010-0229636 A1	16/09/2010	CA 2696227 A1 EP 2205967 A2 EP 2205967 A4 EP 2205967 B1 JP 05612474 B2 JP 2011-500198 A US 8281675 B2 WO 2009-050718 A2 WO 2009-050718 A3	23/04/2009 14/07/2010 23/05/2012 01/05/2013 22/10/2014 06/01/2011 09/10/2012 23/04/2009 11/03/2010
US 2011-0120239 A1	26/05/2011	EP 2325633 A2 EP 2325633 A3 EP 2325633 B1 JP 2011-112645 A US 8511148 B2	25/05/2011 29/02/2012 17/07/2013 09/06/2011 20/08/2013
US 2009-0165578 A1	02/07/2009	AU 2008-335355 A1 CA 2707965 A1 EP 2227683 A1 JP 2011-506934 A WO 2009-076231 A1	18/06/2009 18/06/2009 15/09/2010 03/03/2011 18/06/2009
US 2006-0260422 A1	23/11/2006	JP 04764661 B2 JP 2006-322742 A US 7469608 B2	07/09/2011 30/11/2006 30/12/2008

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

G06F 19/00(2011.01)i, G01N 33/00(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

G06F 19/00; G01N 15/06; B30B 15/30; G01N 33/00; B23P 11/00; G01N 37/00

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: 비수용성, 평가, 극성 용해도 상수, 비극성 용해도 상수, 수소결합 용해도 상수

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	US 2006-0144171 A1 (ERIC D. CARLSON 등) 2006.07.06 단락 [0058]-[0068] 및 도면 1 참조.	1-9
A	US 2010-0229636 A1 (GALIT LEVIN 등) 2010.09.16 단락 [0070]-[0077] 및 도면 1, 2 참조	1-9
A	US 2011-0120239 A1 (JEREMY FETVEDT) 2011.05.26 단락 [0019]-[0027] 및 도면 1, 2 참조.	1-9
A	US 2009-0165578 A1 (MICHAEL ZAMLOOT 등) 2009.07.02 단락 [0031]-[0039] 및 도면 1-4 참조.	1-9
A	US 2006-0260422 A1 (KAZUTOSHI SEKIZAWA 등) 2006.11.23 단락 [0070]-[0112] 및 도면 1-3 참조.	1-9

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

“A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌

“T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌

“E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌

“X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.

“L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌

“Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.

“O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일

2016년 03월 18일 (18.03.2016)

국제조사보고서 발송일

2016년 03월 21일 (21.03.2016)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소

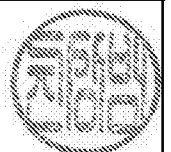
대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-472-7140

심사관

진상범

전화번호 +82-42-481-8398



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
US 2006-0144171 A1	2006/07/06	US 2004-0168529 A1 US 7024955 B2 US 7234365 B2 WO 2004-078131 A2 WO 2004-078131 A3 WO 2004-079338 A2 WO 2004-079338 A3	2004/09/02 2006/04/11 2007/06/26 2004/09/16 2005/01/20 2004/09/16 2004/12/29
US 2010-0229636 A1	2010/09/16	CA 2696227 A1 EP 2205967 A2 EP 2205967 A4 EP 2205967 B1 JP 05612474 B2 JP 2011-500198 A US 8281675 B2 WO 2009-050718 A2 WO 2009-050718 A3	2009/04/23 2010/07/14 2012/05/23 2013/05/01 2014/10/22 2011/01/06 2012/10/09 2009/04/23 2010/03/11
US 2011-0120239 A1	2011/05/26	EP 2325633 A2 EP 2325633 A3 EP 2325633 B1 JP 2011-112645 A US 8511148 B2	2011/05/25 2012/02/29 2013/07/17 2011/06/09 2013/08/20
US 2009-0165578 A1	2009/07/02	AU 2008-335355 A1 CA 2707965 A1 EP 2227683 A1 JP 2011-506934 A WO 2009-076231 A1	2009/06/18 2009/06/18 2010/09/15 2011/03/03 2009/06/18
US 2006-0260422 A1	2006/11/23	JP 04764661 B2 JP 2006-322742 A US 7469608 B2	2011/09/07 2006/11/30 2008/12/30