



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0065504
(43) 공개일자 2020년06월09일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G01N 21/65 (2006.01) G01N 15/06 (2006.01)
(52) CPC특허분류
G01N 21/658 (2013.01)
G01N 15/06 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-0152035
(22) 출원일자 2018년11월30일
심사청구일자 2018년11월30일

(71) 출원인
서강대학교산학협력단
서울특별시 마포구 백범로 35 (신수동, 서강대학교)
(72) 발명자
김동철
서울 마포구 신수동1 백범로 35 서강대학교 아담
살관 701호
강대욱
서울특별시 마포구 신수동1 백범로 35 서강대학교
리치과학관 611호
윤재근
서울특별시 마포구 신수동1 백범로 35 서강대학교
아담살관 701호
(74) 대리인
특허법인세림

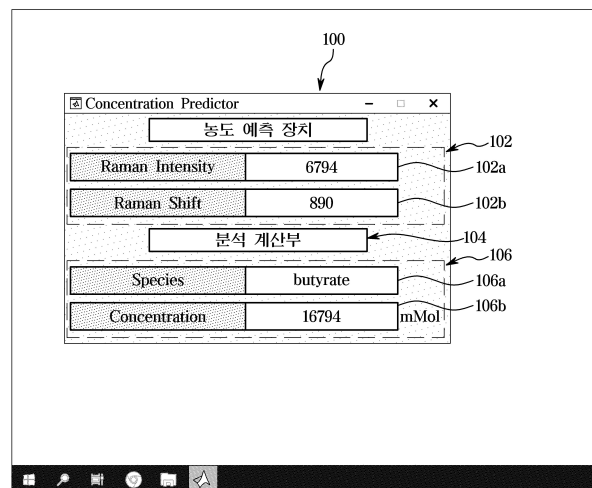
전체 청구항 수 : 총 6 항

(54) 발명의 명칭 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치 및 그 예측 방법

(57) 요약

수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치 및 그 예측 방법이 개시된다. 본 발명의 실시 예에 따른 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치 및 그 예측 방법은, 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측을 위해 표면증강라만산란(Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS) 실험 결과 정보를 입력하는 시뮬레이션 조건 입력부; 입력된 표면증강라만산란 실험 결과 정보를 확인하여 분석하고, 확인하여 분석된 표면증강라만산란 실험 결과 정보와 일치하는 물질 종류를 도출하며, 도출된 물질 종류를 확인하여 분석하고, 확인하여 분석된 물질 종류에 따른 지배방정식을 선정하며, 선정된 지배방정식을 계산하는 분석 계산부; 및 계산된 지배방정식에 의해 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도를 출력하는 시뮬레이션 출력부를 포함한다.

대표도 - 도1



이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 201832014

부처명 과학기술정보통신부

연구관리전문기관 한국연구재단

연구사업명 C1가스리파이너리사업

발 연구과제명 표면증강라만분광법을 이용한 비평형 용존 C1 가스 및 대사산물 실시간 모니터링 기술 개

기 여 율 1/2

주관기관 서강대학교

연구기간 2018.04.01 ~ 2018.12.31

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 201821048

부처명 교육부

연구관리전문기관 한국연구재단

연구사업명 일반연구자지원사업

연구과제명 계면유도 자기조립현상 기반의 차세대 나노공정 설계시스템 개발

기 여 율 1/2

주관기관 서강대학교

연구기간 2018.09.01 ~ 2019.06.30

명세서

청구범위

청구항 1

수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측을 위해 표면증강라만산란(Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS) 실험 결과 정보를 입력하는 시뮬레이션 조건 입력부;

상기 입력된 표면증강라만산란 실험 결과 정보를 확인하여 분석하고, 상기 확인하여 분석된 표면증강라만산란 실험 결과 정보와 일치하는 물질 종류를 도출하며, 상기 도출된 물질 종류를 확인하여 분석하고, 상기 확인하여 분석된 물질 종류에 따른 지배방정식을 선정하며, 상기 선정된 지배방정식을 계산하는 분석 계산부; 및

상기 계산된 지배방정식에 의해 상기 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도를 출력하는 시뮬레이션 출력부를 포함하는 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 표면증강라만산란 실험 결과 정보는 Raman Intensity값과 Raman Shift값을 포함하는 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 지배방정식은 물질 종류에 따른 금속 나노 입자 주변 농도와 라만 강도간의 관계식, 금속 나노 입자 주변 농도와 수용액 농도간의 관계식, 수용액 농도와 라만 강도간의 관계식을 포함하는 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치.

청구항 4

제 3 항에 있어서,

상기 라만 강도는 레이저 강도와 화학적 증강 인자 및 전계 증강 인자와 금속 나노 입자 주변 농도에 의해 결정되는 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치.

청구항 5

제 1 항에 있어서,

상기 물질 종류와 상기 물질 농도는 Acetate 농도와 Butyrate 농도 및 2, 3-Butanediol 농도와 Methanol 농도에 해당하는 대사산물 4종류 농도인 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치.

청구항 6

수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측을 위해 표면증강라만산란(Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS) 실험 결과 정보를 시뮬레이션 조건 입력부에서 입력하는 단계;

상기 입력된 표면증강라만산란 실험 결과 정보를 분석 계산부에서 확인하여 분석하는 단계;

상기 확인하여 분석된 표면증강라만산란 실험 결과 정보와 일치하는 물질 종류를 상기 분석 계산부에서 도출하는 단계;

상기 도출된 물질 종류를 상기 분석 계산부에서 확인하여 분석하는 단계;

상기 확인하여 분석된 물질 종류에 따른 지배방정식을 상기 분석 계산부에서 선정하는 단계;

상기 선정된 지배방정식을 상기 분석 계산부에서 계산하는 단계; 및

상기 계산된 지배방정식에 의해 상기 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도를 시뮬레이션 출력부에서 출력하는 단계를 포함하는 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치 및 그 예측 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 일반적으로, 표면 증강 라만 산란(SERS: Surface-Enhanced Raman Scattering)은 금속 나노표면에 화학 표적물질이 근접한 경우, 입사된 빛의 파장과 표면 자유전자들 간에 공명에 의해 화학 표적물질의 라만신호가 증폭되는 효과를 나타낸다.

[0003] 이러한, 표면 증강 라만 산란은 수용액상의 농도를 측정하는데에 이용되고 있다.

[0004] 일례로, 일본공개특허공보 JP 2013-142546(2013.07.22)에 기재된 바와 같이, 검출된 표면 증강 라만 산란의 강도 최대값에 기초해 생체 성분 농도 측정 장치를 이용하여 피검용액중의 생체 성분의 농도를 측정할 수 있는 생체 성분의 농도를 측정하는 방법 및 측정 장치가 개시되었다.

[0005] 그런데, 종래 생체 성분의 농도를 측정하는 방법 및 측정 장치는 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도를 정확하게 도출하는데에 한계가 있었다.

선행기술문헌

특허문헌

[0006] (특허문헌 0001) 일본공개특허공보 JP 2013-142546(2013.07.22)

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 본 발명의 실시 예는, 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도를 정확하게 예측할 수가 있는 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치 및 그 예측 방법을 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0008] 본 발명의 일 측면에 따르면, 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측을 위해 표면증강라만산란(Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS) 실험 결과 정보를 입력하는 시뮬레이션 조건 입력부; 입력된 표면증강라만산란 실험 결과 정보를 확인하여 분석하고, 확인하여 분석된 표면증강라만산란 실험 결과 정보와 일치하는 물질 종류를 도출하며, 도출된 물질 종류를 확인하여 분석하고, 확인하여 분석된 물질 종류에 따른 지배방정식을 선정하며, 선정된 지배방정식을 계산하는 분석 계산부; 및 계산된 지배방정식에 의해 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도를 출력하는 시뮬레이션 출력부를 포함할 수가 있다.

[0009] 본 발명의 다른 측면에 따르면, 표면증강라만산란 실험 결과 정보는 Raman Intensity값과 Raman Shift값을 포함할 수가 있다.

[0010] 본 발명의 또 다른 측면에 따르면, 지배방정식은 물질 종류에 따른 금속 나노 입자 주변 농도와 라만 강도간의 관계식, 금속 나노 입자 주변 농도와 수용액 농도간의 관계식, 수용액 농도와 라만 강도간의 관계식을 포함할 수가 있다.

[0011] 본 발명의 또 다른 측면에 따르면, 라만 강도는 레이저 강도와 화학적 증강 인자 및 전계 증강 인자와 금속 나노 입자 주변 농도에 의해 결정될 수가 있다.

[0012] 본 발명의 또 다른 측면에 따르면, 물질 종류와 물질 농도는 Acetate 농도와 Butyrate 농도 및 2, 3-Butanediol 농도와 Methanol 농도에 해당하는 대사산물 4종류 농도일 수가 있다.

[0013] 본 발명의 또 다른 측면에 따르면, 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측을 위해 표면증강라만산란(Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS) 실험 결과 정보를 시뮬레이션 조건 입력부에서 입력하는 단계; 입력된 표면증강라만산란 실험 결과 정보를 분석 계산부에서 확인하여 분석하는 단계; 확인하여 분석된 표면증강라만산란 실험 결과 정보와 일치하는 물질 종류를 분석 계산부에서 도출하는 단계; 도출된 물질 종류를 분석 계산부에서 확인하여 분석하는 단계; 확인하여 분석된 물질 종류에 따른 지배방정식을 분석 계산부에서 선정하는 단계; 선정된 지배방정식을 분석 계산부에서 계산하는 단계; 및 계산된 지배방정식에 의해 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도를 시뮬레이션 출력부에서 출력하는 단계를 포함할 수가 있다.

발명의 효과

[0014] 본 발명의 실시 예에 따른 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치 및 그 예측 방법은, 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도를 정확하게 예측할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0015] 도 1은 본 발명의 일 실시 예에 따른 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치를 나타낸 도면.
 도 2는 Acetate의 수용액 농도별 금속 나노 입자 주변 농도값을 나타낸 도면.
 도 3은 Butyrate의 수용액 농도별 금속 나노 입자 주변 농도값을 나타낸 도면.
 도 4는 2,3-Butanediol의 수용액 농도별 금속 나노 입자 주변 농도값을 나타낸 도면.
 도 5는 Methanol의 수용액 농도별 금속 나노 입자 주변 농도값을 나타낸 도면.
 도 6은 Acetate에 해당하는 지배방정식의 수용액 농도별 라만 강도값과 실제 실험 결과의 수용액 농도별 라만 강도값을 나타낸 도면.
 도 7은 Butyrate에 해당하는 지배방정식의 수용액 농도별 라만 강도값과 실제 실험 결과의 수용액 농도별 라만 강도값을 나타낸 도면.
 도 8은 2, 3-Butanediol에 해당하는 지배방정식의 수용액 농도별 라만 강도값과 실제 실험 결과의 수용액 농도별 라만 강도값을 나타낸 도면.
 도 9는 Methanol에 해당하는 지배방정식의 수용액 농도별 라만 강도값과 실제 실험 결과의 수용액 농도별 라만 강도값을 나타낸 도면.
 도 10은 본 발명의 일 실시 예에 따른 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치를 이용한 예측 방법을 일 예로 나타낸 순서도.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0016] 이하에서는 본 발명의 실시 예를 첨부 도면을 참조하여 상세히 설명한다. 이하의 실시 예는 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자에게 본 발명의 사상을 충분히 전달하기 위해 제시하는 것이다. 본 발명은 여기서 제시한 실시 예만으로 한정되지 않고 다른 형태로 구체화될 수도 있다. 도면은 본 발명을 명확히 하기 위해 설명과 관계없는 부분의 도시를 생략하고, 이해를 돕기 위해 구성요소의 크기를 다소 과장하여 표현할 수 있다.

[0017] 도 1은 본 발명의 일 실시 예에 따른 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치를 나타낸 도면이고, 도 2는 Acetate의 수용액 농도별 금속 나노 입자 주변 농도값을 나타낸 도면이다.

[0018] 도 3은 Butyrate의 수용액 농도별 금속 나노 입자 주변 농도값을 나타낸 도면이고, 도 4는 2,3-Butanediol의 수용액 농도별 금속 나노 입자 주변 농도값을 나타낸 도면이다.

[0019] 도 5는 Methanol의 수용액 농도별 금속 나노 입자 주변 농도값을 나타낸 도면이고, 도 6은 Acetate에 해당하는 지배방정식의 수용액 농도별 라만 강도값과 실제 실험 결과의 수용액 농도별 라만 강도값을 나타낸 도면이다.

[0020] 도 7은 Butyrate에 해당하는 지배방정식의 수용액 농도별 라만 강도값과 실제 실험 결과의 수용액 농도별 라만 강도값을 나타낸 도면이고, 도 8은 2, 3-Butanediol에 해당하는 지배방정식의 수용액 농도별 라만 강도값과 실제 실험 결과의 수용액 농도별 라만 강도값을 나타낸 도면이다.

[0021] 도 9는 Methanol에 해당하는 지배방정식의 수용액 농도별 라만 강도값과 실제 실험 결과의 수용액 농도별 라만 강도값을 나타낸 도면이다.

[0022] 도 1을 참조하면, 본 발명의 일 실시 예에 따른 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치(100)는 시뮬레이션 조건 입력부(102)와 분석 계산부(104) 및 시뮬레이션 출력부(106)를 포함한다.

[0023] 시뮬레이션 조건 입력부(102)는 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측을 위해 표면증강라만산란(Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS) 실험 결과 정보를 입력한다.

[0024] 이때, 물질 종류와 물질 농도는 Acetate 농도와 Butyrate 농도 및 2, 3-Butanediol 농도와 Methanol 농도에 해당하는 대사산물 4종류 농도일 수가 있다.

[0025] 여기서, 표면증강라만산란 실험 결과 정보는 Raman Intensity값(102a)과 Raman Shift값(102b)을 포함할 수가 있다.

[0026] 이때, 표면증강라만산란 실험 결과 정보는 레이저 강도가 0.005 W이고, 레이저 파장이 532 nm이며, 금속 나노 입자의 종류가 은이고, 금속 나노 입자의 종횡비가 4인 실험 조건일 때에, 대사산물 4종류중 Butyrate의 Raman Shift값은 하기 <표 1>과 같이 890임을 알 수가 있고, Butyrate의 수용액 농도가 10mMol인 경우 Butyrate의 Raman Intensity값은 6794임을 알 수가 있다.

[0027] <표 1>

Concentration	Acetate Raman shift (925 cm ⁻¹)	Butyrate Raman shift (890 cm ⁻¹)	Concentration	2,3- Butanediol Raman shift (761 cm ⁻¹)	Methanol Raman shift (1009 cm ⁻¹)
100mMol	.	10269	10mMol	7454	4006
10mMol	15104	6794	1mMol	4498	3724
1mMol	10306	4788	0.1mMol	3934	3604
0.1mMol	4090	.	0mMol	3501	3501
0mMol	3501	3501			

[0028]

[0029] 여기서, Raman Shift값(102b)은 도시하지는 않았지만, 산란된 빛이 레일리 산란(Rayleigh Scattering)에 대해 얼마만큼 shift 되었는가를 라만 산란 측정 장치(미도시)의 스펙트럼(미도시)으로 표시할 수가 있다.

[0030] 이때, Raman shift는 분자의 진동 주파수에 해당하고, 분자의 진동 주파수는 각각의 분자마다 고유의 영역을 갖으므로, Raman shift는 물질의 정성(Qualitative) 및 정량(Quantitative)을 분석하는데에 이용될 수가 있다.

[0031] 분석 계산부(104)는 시뮬레이션 조건 입력부(102)에 의해 입력된 표면증강라만산란 실험 결과 정보를 확인하여 분석하고, 확인하여 분석된 표면증강라만산란 실험 결과 정보와 일치하는 물질 종류를 도출하며, 도출된 물질 종류를 확인하여 분석한다.

[0032] 또한, 분석 계산부(104)는 확인하여 분석된 물질 종류에 따른 지배방정식을 선정하며, 선정된 지배방정식을 계산한다.

[0033] 이때, 지배방정식은 물질 종류에 따른 금속 나노 입자 주변 농도와 라만 강도간의 관계식, 금속 나노 입자 주변 농도와 수용액 농도간의 관계식, 수용액 농도와 라만 강도간의 관계식을 포함할 수가 있다.

[0034] 일례로, 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 라만 강도($Raman Intensity$)간의 관계식은 하기 <수학식 1>과 같이 나타낼 수가 있다.

[0035] <수학식 1>

$$Raman Intensity = I \cdot \sigma \cdot EF^4 \cdot C_a$$

[0036]

[0037] 여기서, 라만 강도($Raman Intensity$)는 레이저 강도(I)와 화학적 증강 인자(σ) 및 전계 증강 인자

(EF)와 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)에 의해 결정될 수가 있다.

[0038] 다른 일례로, 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 수용액 농도(C)간의 관계식은 하기 <수학식 2>와 같이 나타낼 수가 있다.

[0039] <수학식 2>

[0040]
$$C_a = f_1(C)$$

[0041] 또 다른 일례로, 수용액 농도(C)와 라만 강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식은 <수학식 3>과 같이 나타낼 수가 있다.

[0042] <수학식 3>

[0043]
$$Raman\ intensity = f_2(C)$$

[0044] 이러한, 분석 계산부(104)는 물질 종류에 따른 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 라만 강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식인 <수학식 1>, 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 수용액 농도(C)간의 관계식인 <수학식 2>, 수용액 농도(C)와 라만 강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식인 <수학식 3>을 포함하는 물질 종류의 지배방정식을 선정하고, 선정된 물질 종류의 지배방정식을 계산함으로써, 선정된 물질 종류의 라만 강도($Raman\ Intensity$)에 대응하는 수용액 상의 물질 농도를 예측할 수가 있게 된다.

[0045] 예를 들면, 물질 종류중 대사산물 4종류인 Acetate의 라만 강도($Raman\ Intensity$)는 <수학식 1>을 기초로 하기 <수학식 4>와 같이 나타낼 수가 있고, Acetate의 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 수용액 농도(C)간의 관계식은 <수학식 2>를 기초로 하기 <수학식 5>와 같이 나타낼 수가 있으며, Acetate의 수용액 농도(C)와 라만 강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식은 <수학식 3>을 기초로 하기 <수학식 6>과 같이 나타낼 수가 있다.

[0046] <수학식 4>

[0047]
$$Raman\ Intensity = 167.734 \times C_a$$

[0048] <수학식 5>

[0049]
$$C_a = 78.219 \times (e^{(14.030 \times 10^{-3} \times C)} - 0.750 \times e^{(-1.162 \times C)})$$

[0050] 여기서, Acetate는 수용액 상에서 음전하를 띄게 되어 정전기적 인력에 의해 양전하를 띄는 금속 나노 입자 주변으로 이동하고, Acetate의 이동으로 인해 Acetate의 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)는 수용액 농도(C)와 차이가 발생하게 되며, Acetate의 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)는 증가함.

[0051] 이때, 도 2는 Acetate의 수용액 농도별 금속 나노 입자 주변 농도값(A)을 나타냄.

[0052] <수학식 6>

[0053]
$$Raman\ Intensity = 13.120 \times 10^3 \times e^{(14.030 \times 10^{-3} \times C)} - 9.841 \times 10^3 \times e^{(-1.162 \times C)}$$

[0054] 이러한, 분석 계산부(104)는 Acetate에 따른 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 라만 강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식인 <수학식 4>, 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 수용액 농도(C)간의 관계식인 <수학식 5>, 수용액 농도(C)와 라만 강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식인 <수학식 6>을 포함하는 Acetate의 지배방정식을 선정하고, 선정된 Acetate의 지배방정식을 계산함으로써, 선정된 Acetate의 라만 강도(수학식 6의 $Raman\ Intensity$)에 대응하는 수용액 상의 Acetate 농도를 예측할 수가 있게 된다.

[0055] 다른 예를 들면, 물질 종류중 대사산물 4종류인 Butyrate의 라만 강도($Raman\ Intensity$)는 <수학식 1>을 기초로 하기 <수학식 7>과 같이 나타낼 수가 있고, Butyrate의 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 수용액 농도(C)간의 관계식은 <수학식 2>를 기초로 하기 <수학식 8>과 같이 나타낼 수가 있으며, Butyrate의 수용액 농도(C)와 라만강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식은 <수학식 3>을 기초로 하기 <수학식 9>와 같이 나타낼 수가 있다.

[0056] <수학식 7>

[0057]
$$Raman\ Intensity = 80.879 \times c_a$$

[0058] <수학식 8>

[0059]
$$c_a = 80.404 \times (e^{(4.568 \times 10^{-3} \times c)} - 0.461 \times e^{(-0.543 \times c)})$$

[0060] 여기서, Butyrate는 수용액 상에서 음전하를 띄게 되어 정전기적 인력에 의해 양전하를 띄는 금속 나노 입자 주변으로 이동하고, Butyrate의 이동으로 인해 Butyrate의 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)는 수용액 농도(C)와 차이가 발생하게 되며, Butyrate의 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)는 증가함.

[0061] 이때, 도 3은 Butyrate의 수용액 농도별 금속 나노 입자 주변 농도값(B)을 나타냄.

[0062] <수학식 9>

[0063]
$$Raman\ Intensity = 6.503 \times 10^3 \times e^{(4.568 \times 10^{-3} \times c)} - 3.002 \times 10^3 \times e^{(-0.542 \times c)}$$

[0064] 이러한, 분석 계산부(104)는 Butyrate에 따른 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 라만 강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식인 <수학식 7>, 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 수용액 농도(C)간의 관계식인 <수학식 8>, 수용액 농도(C)와 라만 강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식인 <수학식 9>를 포함하는 Butyrate의 지배방정식을 선정하고, 선정된 Butyrate의 지배방정식을 계산함으로써, 선정된 Butyrate의 라만 강도(수학식 9의 $Raman\ Intensity$)에 대응하는 수용액 상의 Butyrate 농도를 예측할 수가 있게 된다.

[0065] 또 다른 예를 들면, 물질 종류중 대사산물 4종류인 2, 3-Butanediol의 라만 강도($Raman\ Intensity$)는 <수학식 1>을 기초로 하기 <수학식 10>과 같이 나타낼 수가 있고, 2, 3-Butanediol의 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 수용액 농도(C)간의 관계식은 <수학식 2>를 기초로 하기 <수학식 11>과 같이 나타낼 수가 있으며, 2, 3-Butanediol의 수용액 농도(C)와 라만강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식은 <수학식 3>을 기초로 하기 <수학식 12>와 같이 나타낼 수가 있다.

[0066] <수학식 10>

$$Raman\ Intensity = 4.253 \times 10^3 \times e^{(56.120 \times 10^{-3} \times c)} - 0.751 \times 10^3 \times e^{(-7.855 \times c)}$$

[0067]

[0068] <수학식 11>

$$C_a = C$$

[0069]

[0070] 여기서, 2, 3-Butanediol은 수용액 상에서 음전하를 띄지 않아 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)는 변화하지 않으므로, 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 수용액 농도(C)는 같음.

[0071] 이때, 도 4는 2, 3-Butanediol의 수용액 농도별 금속 나노 입자 주변 농도값(D)을 나타냄.

[0072] <수학식 12>

$$Raman\ Intensity = 4.253 \times 10^3 \times e^{(56.120 \times 10^{-3} \times c)} - 0.751 \times 10^3 \times e^{(-7.855 \times c)}$$

[0073]

[0074] 이러한, 분석 계산부(104)는 2, 3-Butanediol에 따른 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 라만 강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식인 <수학식 10>, 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 수용액 농도(C)간의 관계식인 <수학식 11>, 수용액 농도(C)와 라만 강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식인 <수학식 12>를 포함하는 2, 3-Butanediol의 지배방정식을 선정하고, 선정된 2, 3-Butanediol의 지배방정식을 계산함으로써, 선정된 2, 3-Butanediol의 라만 강도(수학식 12의 $Raman\ Intensity$)에 대응하는 수용액 상의 2, 3-Butanediol 농도를 예측할 수가 있게 된다.

[0075] 또 다른 예를 들면, 물질 종류중 대사산물 4종류인 Methanol의 라만 강도($Raman\ Intensity$)는 <수학식 1>을 기초로 하기 <수학식 13>과 같이 나타낼 수가 있고, Methanol의 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 수용액 농도(C)간의 관계식은 <수학식 2>를 기초로 하기 <수학식 14>와 같이 나타낼 수가 있으며, Methanol의 수용액 농도(C)와 라만강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식은 <수학식 3>을 기초로 하기 <수학식 15>와 같이 나타낼 수가 있다.

[0076] <수학식 13>

$$Raman\ Intensity = 3.694 \times 10^3 \times e^{(8.107 \times 10^{-3} \times c)} - 0.193 \times 10^3 \times e^{(-7.298 \times c)}$$

[0077]

[0078] <수학식 14>

$$C_a = C$$

[0079]

[0080] 여기서, Methanol은 수용액 상에서 음전하를 띄지 않아 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)는 변화하지 않으므로, 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 수용액 농도(C)는 같음.

[0081] 이때, 도 5는 Methanol의 수용액 농도별 금속 나노 입자 주변 농도값(E)을 나타냄.

[0082] <수학식 15>

[0083]
$$Raman\ Intensity = 3.694 \times 10^3 \times e^{(8.107 \times 10^{-3} \times C)} - 0.193 \times 10^3 \times e^{(-7.298 \times C)}$$

[0084] 이러한, 분석 계산부(104)는 Methanol에 따른 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 라만 강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식인 <수학식 13>, 금속 나노 입자 주변 농도(C_a)와 수용액 농도(C)간의 관계식인 <수학식 14>, 수용액 농도(C)와 라만 강도($Raman\ Intensity$)간의 관계식인 <수학식 15>를 포함하는 Methanol의 지배방정식을 선정하고, 선정된 Methanol의 지배방정식을 계산함으로써, 선정된 Methanol의 라만 강도(수학식 15의 $Raman\ Intensity$)에 대응하는 수용액 상의 Methanol 농도를 예측할 수가 있게 된다.

[0085] 본 발명의 일 실시 예에 따른 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치(100)는 도 6 내지 도 9에 도시된 바와 같이 각각의 Acetate와 Butyrate 및 2, 3-Butanediol과 Methanol에 해당하는 지배방정식의 수용액 농도별 라만 강도값(F, G, H, I)이 실제 실험 결과의 수용액 농도별 라만 강도값(F', G', H', I')과 일치함을 알 수가 있다.

[0086] 시뮬레이션 출력부(106)는 분석 계산부(104)에 의해 계산된 지배방정식에 의해 수용액 상의 물질 종류(106a)와 물질 농도(106b)를 출력한다.

[0087] 예를 들면, 시뮬레이션 출력부(106)는 분석 계산부(104)에 의해 계산된 Butyrate의 라만 강도(수학식 9의 $Raman\ Intensity$)에 대응하는 수용액 상의 Butyrate 농도를 16794mMol 값으로 출력할 수가 있다.

[0088] 도 10은 본 발명의 일 실시 예에 따른 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치를 이용한 예측 방법을 일 예로 나타낸 순서도이다.

[0089] 도 10을 참조하면, 본 발명의 일 실시 예에 따른 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치(도1의 100)를 이용한 예측 방법(1000)은 입력 단계(S1002)와 분석 단계(S1004, S1006, S1008, S1010) 및 계산 단계(S1012)와 출력 단계(S1014)를 포함한다.

[0090] 입력 단계(S1002)는 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측을 위해 표면증강라만산란(Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS) 실험 결과 정보를 시뮬레이션 조건 입력부(도1의 102)에서 입력한다.

[0091] 이때, 표면증강라만산란 실험 결과 정보는 Raman Intensity값(도1의 102a)과 Raman Shift값(도1의 102b)을 포함할 수가 있고, 물질 종류와 물질 농도는 Acetate 농도와 Butyrate 농도 및 2, 3-Butanediol 농도와 Methanol 농도에 해당하는 대사산물 4종류 농도일 수가 있다.

[0092] 분석 단계(S1004)는 시뮬레이션 조건 입력부(도1의 102)에 의해 입력된 표면증강라만산란 실험 결과 정보를 분석 계산부(도1의 104)에서 확인하여 분석하고, 분석 단계(S1006)는 확인하여 분석된 표면증강라만산란 실험 결과 정보와 일치하는 물질 종류를 분석 계산부(도1의 104)에서 도출한다.

[0093] 분석 단계(S1008)는 도출된 물질 종류를 분석 계산부(도1의 104)에서 확인하여 분석하고, 분석 단계(S1010)는 확인하여 분석된 물질 종류에 따른 지배방정식을 분석 계산부(도1의 104)에서 선정한다.

[0094] 계산 단계(S1012)는 선정된 지배방정식을 분석 계산부(도1의 104)에서 계산한다.

[0095] 이때, 지배방정식은 물질 종류에 따른 금속 나노 입자 주변 농도와 라만 강도간의 관계식(수학식1), 금속 나노 입자 주변 농도와 수용액 농도간의 관계식(수학식2), 수용액 농도와 라만 강도간의 관계식(수학식3)을 포함할 수가 있다.

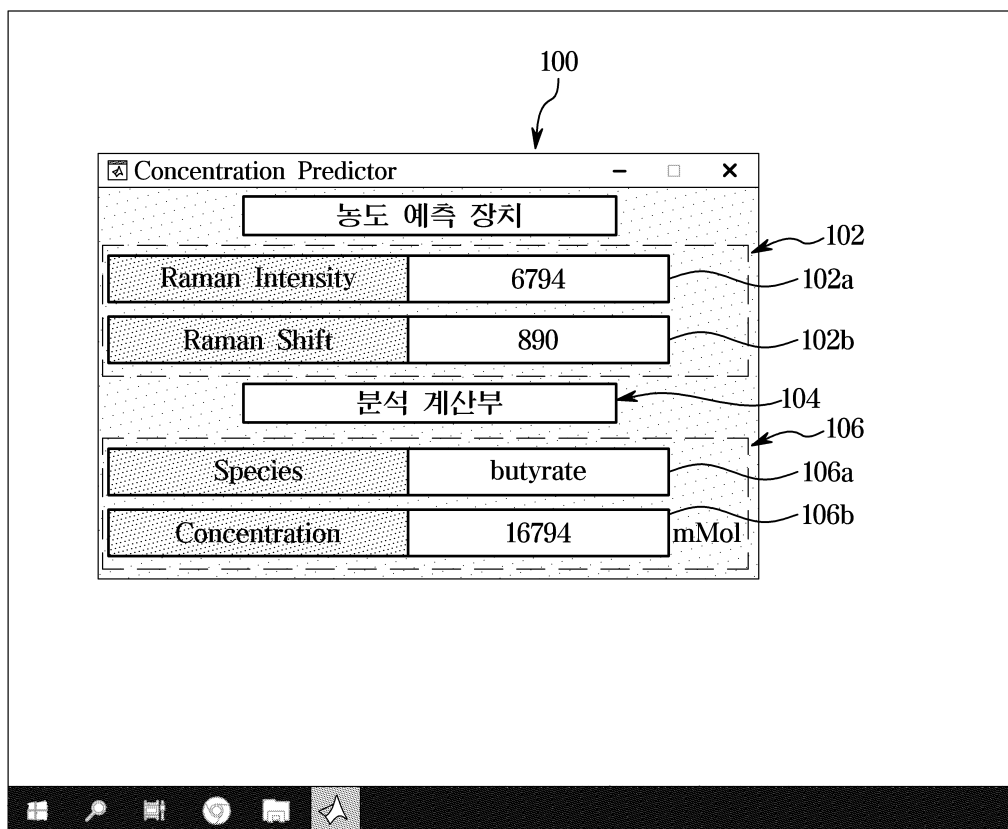
[0096] 예를 들면, 지배방정식은 물질 종류중 대사산물 4종류인 Acetate에 따른 금속 나노 입자 주변 농도와 라만 강도간의 관계식(수학식4), 금속 나노 입자 주변 농도와 수용액 농도간의 관계식(수학식5), 수용액 농도와 라만 강도간의 관계식(수학식6)을 포함할 수가 있다.

[0097] 다른 예를 들면, 지배방정식은 물질 종류중 대사산물 4종류인 Butyrate에 따른 금속 나노 입자 주변 농도와 라만 강도간의 관계식(수학식7), 금속 나노 입자 주변 농도와 수용액 농도간의 관계식(수학식8), 수용액 농도와 라만 강도간의 관계식(수학식9)을 포함할 수가 있다.

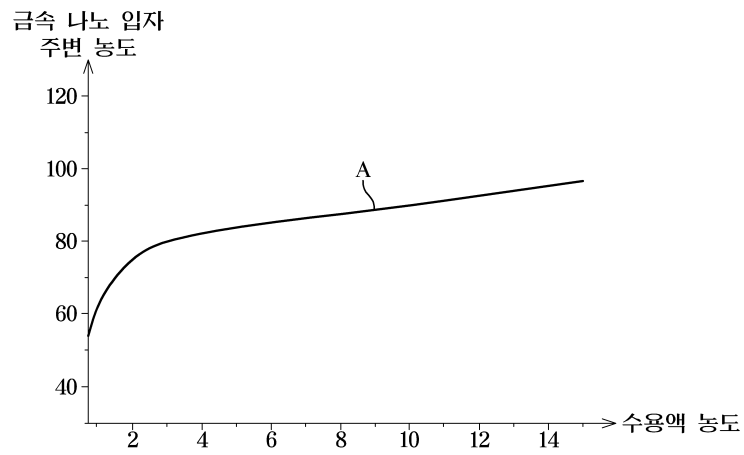
- [0098] 또 다른 예를 들면, 지배방정식은 물질 종류중 대사산물 4종류인 2, 3-Butanediol에 따른 금속 나노 입자 주변 농도와 라만 강도간의 관계식(수학식10), 금속 나노 입자 주변 농도와 수용액 농도간의 관계식(수학식11), 수용액 농도와 라만 강도간의 관계식(수학식12)을 포함할 수가 있다.
- [0099] 또 다른 예를 들면, 지배방정식은 물질 종류중 대사산물 4종류인 Methanol에 따른 금속 나노 입자 주변 농도와 라만 강도간의 관계식(수학식13), 금속 나노 입자 주변 농도와 수용액 농도간의 관계식(수학식14), 수용액 농도와 라만 강도간의 관계식(수학식15)을 포함할 수가 있다.
- [0100] 출력 단계(S1014)는 계산된 지배방정식에 의해 수용액 상의 물질 종류(도1의 106a)와 물질 농도(도1의 106b)를 시뮬레이션 출력부(도1의 106)에서 출력한다.
- [0101] 예를 들면, 출력 단계(S1014)는 분석 계산부(도1의 104)에 의해 계산된 Butyrate의 라만 강도(수학식9의 *Raman Intensity*)에 대응하는 수용액 상의 Butyrate 농도를 시뮬레이션 출력부(도1의 106)에서 16794mMol 값으로 출력할 수가 있다.
- [0102] 한편, 본 발명의 일 실시 예에 따른 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치(100)는 소프트웨어 프로그램으로 제공될 수가 있다.
- [0103] 이와 같은, 본 발명의 일 실시 예에 따른 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도 예측 장치(100) 및 그 예측 방법(1000)은 표면증강라만산란 실험 결과 정보를 입력하여 계산된 지배방정식에 의해 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도를 정확하게 출력할 수가 있으므로, 수용액 상의 물질 종류와 물질 농도를 정확하게 예측할 수가 있게 된다.

도면

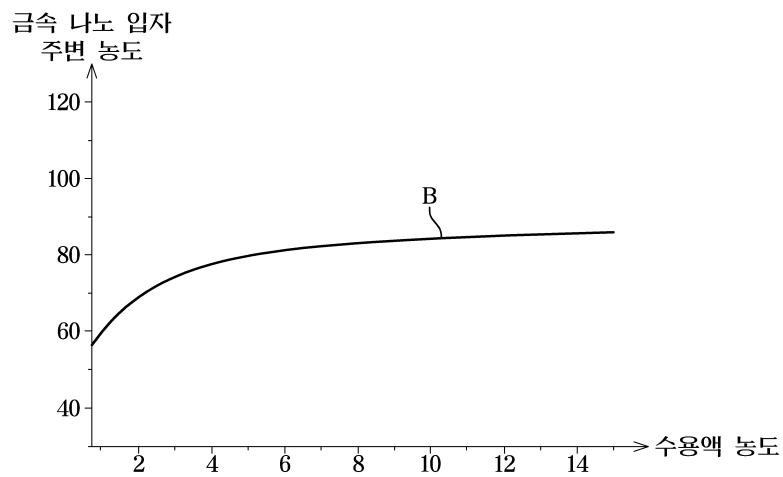
도면1



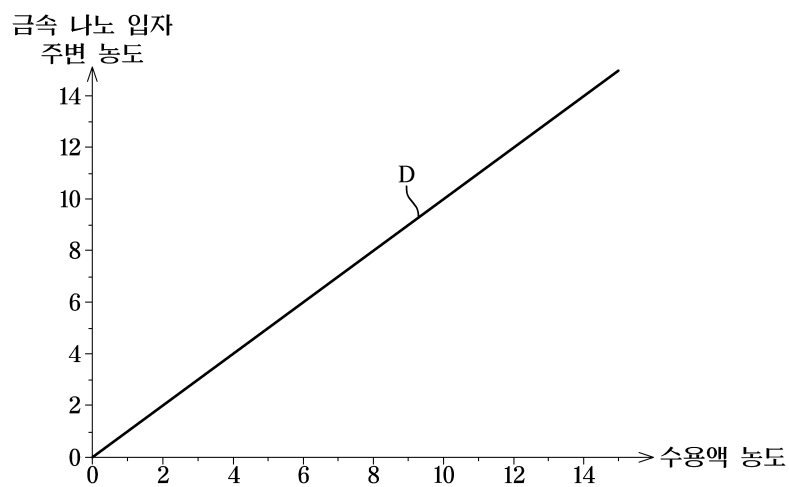
도면2



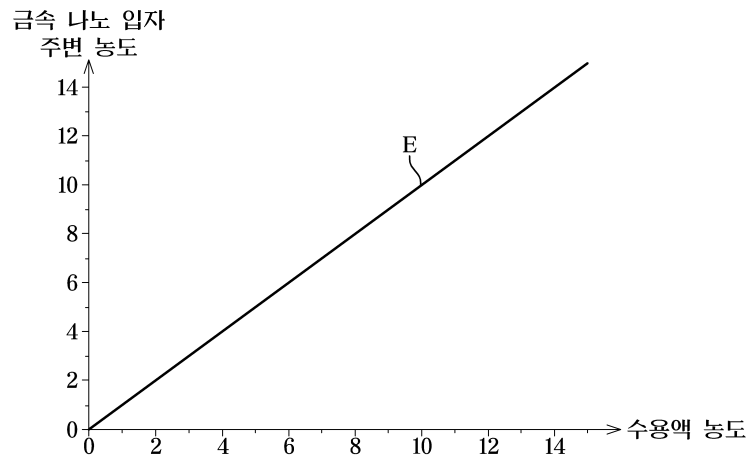
도면3



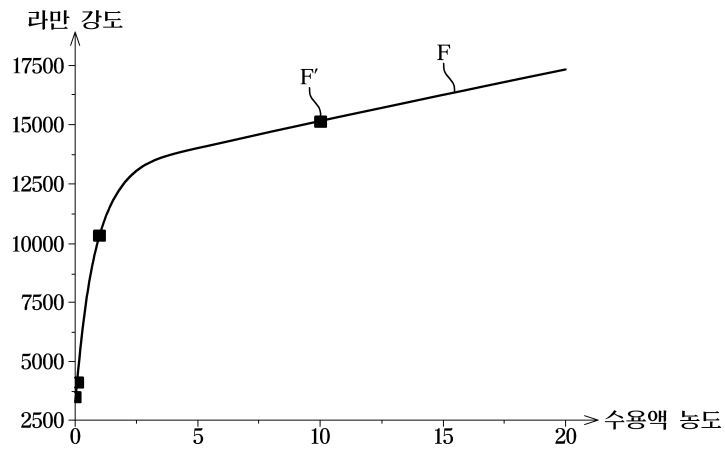
도면4



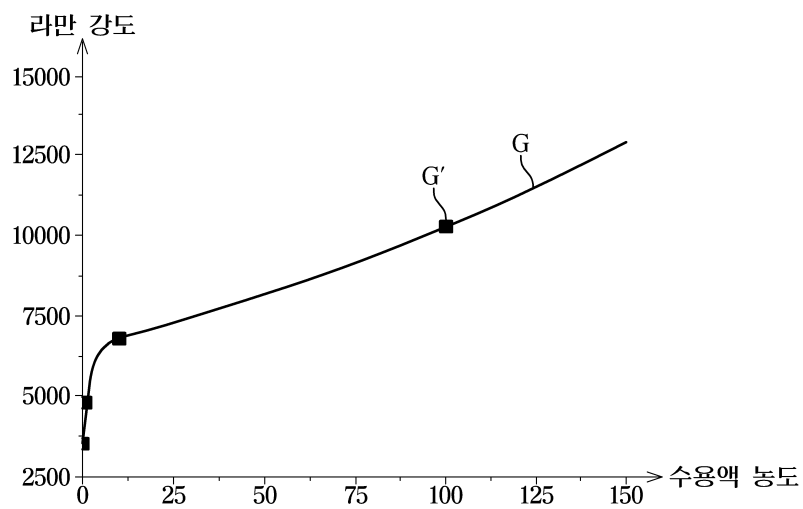
도면5



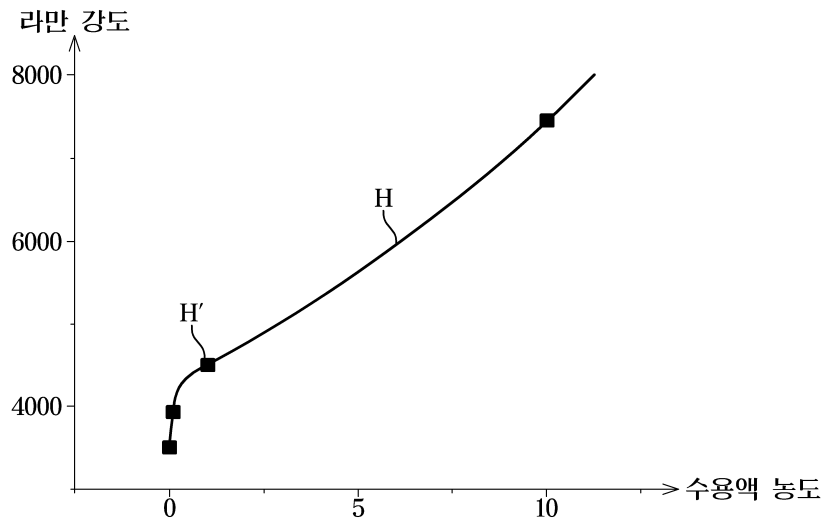
도면6



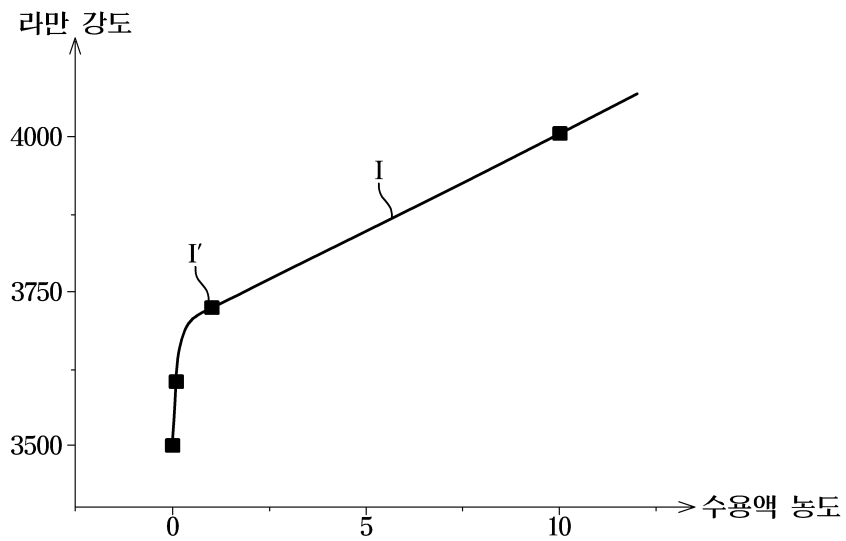
도면7



도면8



도면9



도면10

