

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2015년 3월 5일 (05.03.2015)



(10) 국제공개번호
WO 2015/030397 A1

- (51) 국제특허분류:
G06F 19/00 (2011.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2014/007566
- (22) 국제출원일: 2014년 8월 14일 (14.08.2014)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2013-0104821 2013년 9월 2일 (02.09.2013) KR
- (71) 출원인: 주식회사 엘지화학 (LG CHEM, LTD.)
[KR/KR]; 150-721 서울시 영등포구 여의대로 128, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 이승엽 (LEE, Seungyup); 305-738 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 손용구 (SON, Yonggoo); 305-738 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR). 김정훈 (KIM, Kyoungheon); 305-738 대전시 유성구 문지로 188 LG 화학 기술연구원, Daejeon (KR).
- (74) 대리인: 이명구 (LEE, Myongku); 135-854 서울시 강남구 논현로 38길 12, 6층 (도곡동, 한양빌딩), 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, LT, 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, 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).

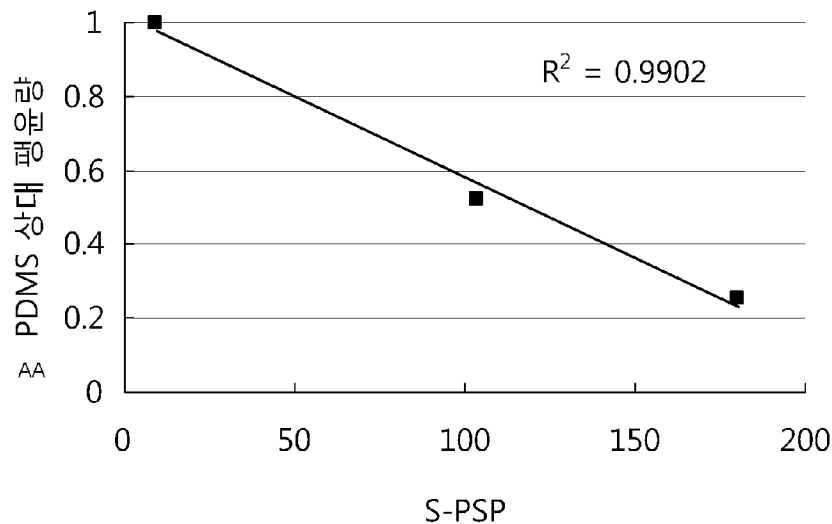
규칙 4.17에 의한 선언서:

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

[다음 쪽 계속]

(54) Title: METHOD FOR CALCULATING SWELLING PHENOMENON EVALUATION INDEX OF POLYMER AND SYSTEM USING SAME

(54) 발명의 명칭: 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법 및 이를 이용한 시스템



AA ... PDMS relative swelling amount

FIG. 1

(57) Abstract: The present invention relates to a method for calculating the swelling phenomenon evaluation index of a polymer and a system using the same and, more specifically, to a method for calculating the swelling phenomenon evaluation index of a polymer, wherein the method employs a solvent-polymer swelling parameter (hereinafter, S-PSP), which is a new method developed to quantitatively evaluate the swelling phenomenon of the polymer with respect to different solvents, and to a system using the same.

(57) 요약서:

[다음 쪽 계속]

**공개:**

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

본 발명은 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법 및 이를 이용한 시스템에 관한 것으로서, 보다 자세하게는 서로 다른 용매에 대한 고분자의 팽윤 현상을 정량적으로 평가할 수 있는 특성 평가 변수를 이용하는 새로운 방법인 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter, 이하 S-PSP)를 개발하여 이를 이용하는 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법 및 이를 이용한 시스템에 관한 것이다.

명세서

발명의 명칭: 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법 및 이를 이용한 시스템

기술분야

- [1] 본 발명은 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법 및 이를 이용한 시스템에 관한 것으로서, 보다 자세하게는 서로 다른 용매에 대한 고분자의 팽윤 현상을 정량적으로 평가할 수 있는 특성 평가 변수를 이용하는 새로운 방법인 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter, 이하 S-PSP)를 개발하여 이를 이용하는 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법 및 이를 이용한 시스템에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 고분자가 용매에 노출되는 경우 고분자의 사슬(Chain) 틈 사이로 용매 분자가 침투해 들어가서 고분자가 팽창하는 팽윤 현상(Swelling)이 발생하게 된다. 고분자의 팽윤 현상은 고분자의 구조(결정 구조 또는 비결정 구조), 분자량, 분자량 분포, 용매의 특성등과 같은 다양한 요인에 의해서 크게 변화하기 때문에 고분자의 팽윤 현상을 명확하게 평가할 수 있는 방법은 현재까지 존재하지 않는다.
- [3] 물질 사이의 용해성(solubility)이나 혼합성(miscibility)을 판단하기 위해서는 물질의 고유 물성을 사용해 서로 유사성 비교를 해야 한다. 용해성이나 혼합성에 영향을 주는 고유 물성은 여러 가지가 있지만, 그 중에서도 물질 내의 결합(interaction) 정도를 정량적인 값으로 나타내는 용해도 인자(Solubility Parameters)가 가장 많이 사용된다. 즉 각 물질은 고유한 용해도 인자 값을 가지고 용해도 인자 값이 유사한 물질끼리는 서로 잘 용해 되거나 섞인다.
- [4] 다양한 이론이나 개념에 근거해 용해도 인자가 제안되고 사용되고 있지만 특히, 고분자의 팽윤 현상을 일으키는 용매의 특성을 가장 정확하게 평가한다고 알려진 방법은 1967년에 Dr.C.Hansen이 제안한 한센 용해도 인자(Hansen Solubility Parameter, 이하 HSP)이다. HSP에서는 물질 내 결합 정도를 다음과 같은 3가지 인자로 세분화해서 고려한다.
- [5] (1) 무극성 분산 결합으로 인해 발생하는 용해도 인자(δD)
- [6] (2) 영구 쌍극자로 인한 극성결합으로 인해 발생하는 용해도 인자(δP)
- [7] (3) 수소결합으로 인해 발생하는 용해도 인자(δH)
- [8] 이와 같이 HSP는 다른 용해도 인자보다 더 자세하게 물질 내의 결합 정보를 제공해 주기 때문에 더 정확하고 체계적으로 물질의 용해성이나 혼합성을 평가할 수 있어 널리 사용된다.
- [9] $HSP=(\delta D, \delta P, \delta H), (J/cm^3)^{1/2}$ (1)
- [10] $\delta_{Tot}=(\delta D^2+\delta P^2+\delta H^2)^{1/2}, (J/cm^3)^{1/2}$ (2)

- [11] HSP는 3가지 요소로 이루어진 공간에서 크기와 방향성을 가지는 벡터(Vector)이고, δTot 는 HSP 벡터의 크기(magnitude)를 나타낸다. HSP를 나타내는 기본 단위는 $(\text{J}/\text{cm}^3)^{1/2}$ 이다. 이러한 HSP값은 HSP를 제안한 Dr.Hansen 그룹에서 개발한 HSPiP(Hansen Solubility Parameters in Practice)라는 프로그램을 사용하여 계산한다.
- [12] 앞서 언급했듯이 두 물질의 HSP값이 유사하면 서로 잘 용해되는데 HSP는 벡터이기 때문에 서로 유사하다고 판단하기 위해서는 각 물질의 3가지 HSP 성분과 HSP의 크기가 모두 유사해야 한다. 모든 물질은 고유의 HSP를 가지고 두 물질의 HSP가 서로 유사하면 잘 용해된다. 이렇듯 HSP는 다른 용해도 인자와 마찬가지로 ‘A like likes a like’ 라는 개념을 바탕으로 제안되어 사용되고 있다.
- [13] 하지만, 상기 한센 용해도 인자만으로 특성을 평가했을 경우에 다양한 요인에 의해서 결정되는 고분자의 팽윤 현상을 평가하는데 어려움이 있다. 이와 같은 필요성에 의해서 본 발명자는 용매의 한센 용해도 인자를 조정(adjustment)한 값을 이용하여 용매가 고분자에 침투하는 팽윤 현상을 정량적으로 평가하는 변수인 용매-고분자 팽윤 지수(S-PSP)를 개발하였고, 고분자의 팽윤 현상을 명확하게 평가할 수 있는 새로운 방법인 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법을 개발하였다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

- [14] 본 발명은 상기와 같은 종래 기술의 문제점을 해결하기 위한 것으로서, 서로 다른 용매에 대한 고분자의 팽윤 현상을 정량적으로 평가할 수 있는 특성 평가 변수인 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)를 이용하여 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 새로운 방법을 제공하는 것을 그 목적으로 한다.

과제 해결 수단

- [15] 상기와 같은 목적을 달성하기 위하여 본 발명은,
- [16] 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법으로,
- [17] a) 용해시키려는 고분자에 대하여 N개의 용매를 사용하여 팽윤 현상을 실험하여 팽윤 정도를 평가하는 단계;
- [18] b) 상기 a)단계의 팽윤 현상 실험에 사용한 N개의 용매에 대한 조정된 한센 용해도 인자를 이용하여 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)를 계산하는 단계; 및
- [19] c) 상기 b)단계에서 용매-고분자 팽윤 지수를 계산한 N개의 용매에 대하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하여 고분자의 팽윤 현상을 확인하는 단계를 포함하는 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법을 제공한다.
- [20] 또한, 본 발명은,

- [21] 용해시키려는 고분자에 대하여 N개의 용매를 사용하여 팽윤 현상을 실험하여 팽윤 정도를 평가하여 데이터를 입력받는 평가 모듈;
- [22] 상기 평가 모듈의 팽윤 현상 실험에 사용한 N개의 용매에 대한 조정된 한센 용해도 인자를 이용하여 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)를 계산하여 데이터를 입력받는 데이터 입력 모듈; 및
- [23] 상기 데이터 입력 모듈에서 용매-고분자 팽윤 지수를 계산한 N개의 용매에 대하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하여 고분자의 팽윤 현상을 확인하여 데이터를 입력받는 확인 모듈을 포함하는 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 시스템을 제공한다.

발명의 효과

- [24] 본 발명에 따른 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법은 서로 다른 용매에 대한 고분자의 팽윤 현상을 정량적으로 평가할 수 있는 특성 평가 변수인 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)를 이용한 새로운 방법에 관한 것으로, 상기 용매-고분자 팽윤 지수는 팽윤 현상으로 발생하는 고분자의 부피 또는 무게 증가량을 예측하는데 유용하게 사용될 수 있다. 본 발명에 따르면 고분자의 성능 및 특성에 큰 영향을 미치는 고분자의 팽윤 현상을 기존의 방법과 비교하여 정확하게 평가할 수 있으므로 고분자 물질 개발 및 고분자를 이용하는 공정 성능 향상에 매우 유용한 장점이 있어, 향후 고분자 물질을 보다 체계적으로 이용 및 평가하는데 그 효용성이 클 것으로 기대할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [25] 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)와 고분자의 상대 팽윤량의 상관 관계를 나타낸 그래프이다.

발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [26] 이하, 본 발명을 상세하게 설명한다.
- [27] 본 발명에 따른 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법은,
- [28] a) 용해시키려는 고분자에 대하여 N개의 용매를 사용하여 팽윤 현상을 실험하여 팽윤 정도를 평가하는 단계;
- [29] b) 상기 a)단계의 팽윤 현상 실험에 사용한 N개의 용매에 대한 조정된 한센 용해도 인자를 이용하여 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)를 계산하는 단계; 및
- [30] c) 상기 b)단계에서 용매-고분자 팽윤 지수를 계산한 N개의 용매에 대하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하여 고분자의 팽윤 현상을 확인하는 단계를 포함한다.
- [31] 본 발명의 상기 a)단계의 고분자의 팽윤 정도는 용매가 고분자에 침투하여 팽윤되는 고분자의 부피 증가량 또는 무게 증가량을 측정하는 것을 포함한다.

- [32] 더욱 구체적으로, 상기 고분자의 팽윤 정도는 고분자의 상대 팽윤량으로 측정하고, 상기 고분자의 상대 팽윤량은 각 용매에 대한 고분자의 팽윤 무게 증가량을 N개의 용매 중 팽윤되는 양이 최대인 값으로 나눈 값인 것을 특징으로 한다.
- [33] 용매의 개수 N은 0보다 큰 자연수인 경우 특별한 제한은 없지만, 3 내지 20의 정수인 것이 바람직하다.
- [34] 본 발명은, 상기 b)단계에서 용매-고분자 팽윤 지수(S-PSP)를 계산하는 것은, 하기 식 1 내지 식 3을 이용하여 계산하는 것을 특징으로 한다.
- [35] [식 1]
- [36]
$$S-PSP\{Ai\} = (a0x(ADJ_D\{Ai\})^{b0} + a1x(ADJ_P\{Ai\})^{b1} + a2x(ADJ_H\{Ai\})^{b2})^c$$
- [37] [식 2]
- [38]
$$ADJ_D\{Ai\} = F(D\{Ai\}), ADJ_P\{Ai\} = F(P\{Ai\}), ADJ_H\{Ai\} = F(H\{Ai\})$$
- [39] [식 3]
- [40]
$$F(X) = d0 \times \exp(X/d1) \text{ or } F(X) = d2 \times \log_{10}((X+1)/d3)$$
- [41] 상기 식 1에서 Ai는 고분자 팽윤 실험에 사용한 N개의 용매 중 i번째 용매를 나타내고, a0, a1, a2는 실수이고, b0, b1, b2는 실수이고, c는 실수이다. 상기 식 2에서 ADJ_D{Ai}, ADJ_P{Ai}, ADJ_H{Ai}는 각각 조정된 한센 용해도 인자를 나타내고, 임의의 용매 Ai에 대한 D{Ai}, P{Ai}, H{Ai}는 각각 무극성 분산 결합으로 인해 발생하는 용해도 인자, 영구 쌍극자로 인한 극성결합으로 인해 발생하는 용해도 인자, 수소결합으로 인해 발생하는 용해도 인자를 나타낸다. 상기 식 3에서 F(X)는 용매 Ai의 한센 용해도 인자를 조정하는 함수를 나타내는 것으로, d0, d1, d2, d3은 실수이다. 상기에서 b0는 0 내지 3.5의 실수, b1은 0 내지 5.0의 실수, b2는 0 내지 4.0의 실수인 것이 바람직하다.
- [42] 용매-고분자 팽윤 지수는 고분자의 팽윤 현상을 평가하기 위해서 용매의 한센 용해도 인자를 조정(adjustment)한 값을 바탕으로 개발되었다.
- [43] 본 발명은, 상기 c)단계에서 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하여 고분자의 팽윤 현상을 확인하는 것은,
- [44] i) 하기 식 4를 이용하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하는 단계; 및
- [45] ii) 상기 i)단계에서 계산한 용매-고분자 팽윤 지수 거리가 임계값(cut-off: 0보다 큰 실수)보다 크면, 계산을 종료함으로써 상기에서 계산된 용매-고분자 팽윤 지수가 고분자의 팽윤 현상을 나타내는 것을 확인하고, 임계값 보다 작거나 같으면, 상기 b)단계의 조정된 한센 용해도 인자를 변경하여 상기 b)단계 내지 c)단계를 반복함으로써 용매-고분자 팽윤 지수의 값을 계산하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리가 임계값 보다 큰 경우를 확인하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 한다.

- [46] [식 4]
- [47] $S\text{-Distance} = | \text{Max-S-PSP} - \text{Min-S-PSP} |$
- [48] 상기 식 4에서 S-PSP는 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter)를 나타내고, Max-S-PSP는 N개의 S-PSP값 중에서 최대값을 나타내고, Min-S-PSP는 N개의 S-PSP값 중에서 최소값을 나타낸다.
- [49] 구체적으로, 상기 c)단계에서 임계값(cut-off)은 기준이 되는 값으로, 0보다 큰 실수인 경우 특별한 제한은 없다. 즉, 미리 정해 놓은 임계값보다 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)의 크기가 큰 경우에만 S-PSP가 고분자의 팽윤 현상을 명확하게 설명함을 나타낸다. 보다 구체적으로, 상기 임계값(cut-off)은 고분자의 팽윤 현상이 발생하는 범위를 나타내고, 0에 가까운 값을 가질수록 팽윤 현상이 발생하는 범위가 작은 것을 나타낸다. 상기 임계값은 N개의 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)의 최대값의 20% 내지 40%의 값을 갖는 실수인 것이 바람직하다.
- [50] 또한, 본 발명은 상기에서 살펴본 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법을 이용한 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 시스템을 제공한다.
- [51] 구체적으로, 용해시키려는 고분자에 대하여 N개의 용매를 사용하여 팽윤 현상을 실험하여 팽윤 정도를 평가하여 데이터를 입력받는 평가 모듈;
- [52] 상기 평가 모듈의 팽윤 현상 실험에 사용한 N개의 용매에 대한 조정된 한센 용해도 인자를 이용하여 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)를 계산하여 데이터를 입력받는 데이터 입력 모듈; 및
- [53] 상기 데이터 입력 모듈에서 용매-고분자 팽윤 지수를 계산한 N개의 용매에 대하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하여 고분자의 팽윤 현상을 확인하여 데이터를 입력받는 확인 모듈을 포함하는 것을 특징으로 한다.
- [54] 상기 평가 모듈의 고분자의 팽윤 정도는 용매가 고분자에 침투하여 팽윤되는 고분자의 부피 증가량 또는 무게 증가량을 측정하는 모듈 일 수 있다.
- [55] 구체적으로, 상기 고분자의 팽윤 정도는 고분자의 상대 팽윤량으로 측정하고, 상기 고분자의 상대 팽윤량은 각 용매에 대한 고분자의 팽윤 무게 증가량을 N개의 용매 중 팽윤되는 양이 최대인 값으로 나눈 값인 것을 특징으로 할 수 있다.
- [56] 또한, 상기 평가 모듈의 용매의 개수 N은 0보다 큰 자연수인 경우 특별한 제한은 없지만, 3 내지 20의 정수인 것이 바람직하다.
- [57] 상기 데이터 입력 모듈의 용매-고분자 팽윤 지수(S-PSP)를 계산하는 것은, 하기 식 1 내지 식 3을 이용하여 계산하는 것을 특징으로 하는 모듈 일 수 있다.
- [58] [식 1]
- [59] $S\text{-PSP}\{Ai\} = (a0x(ADJ_D\{Ai\})^{b0} + a1x(ADJ_P\{Ai\})^{b1} + a2x(ADJ_H\{Ai\})^{b2})^c$
- [60] [식 2]
- [61] $ADJ_D\{Ai\} = F(D\{Ai\}), ADJ_P\{Ai\} = F(P\{Ai\}), ADJ_H\{Ai\} = F(H\{Ai\})$

[62] [식 3]

[63] $F(X)=d0 \times \exp(X/d1)$ or $F(X)=d2 \times \log_{10}((X+1)/d3)$

[64] 상기 식 1에서 A_i 는 고분자 팽윤 실험에 사용한 N개의 용매 중 i번째 용매를 나타내고, a_0, a_1, a_2 는 실수이고, b_0, b_1, b_2 는 실수이고, c 는 실수이다. 상기 식 2에서 $ADJ_D\{A_i\}, ADJ_P\{A_i\}, ADJ_H\{A_i\}$ 는 각각 조정된 한센 용해도 인자를 나타내고, 임의의 용매 A_i 에 대한 $D\{A_i\}, P\{A_i\}, H\{A_i\}$ 는 각각 무극성 분산 결합으로 인해 발생하는 용해도 인자, 영구 쌍극자로 인한 극성결합으로 인해 발생하는 용해도 인자, 수소결합으로 인해 발생하는 용해도 인자를 나타낸다. 상기 식 3에서 $F(X)$ 는 용매 A_i 의 한센 용해도 인자를 조정하는 함수를 나타내는 것으로, d_0, d_1, d_2, d_3 은 실수이다. 상기에서 상기 b_0 는 0 내지 3.5의 실수, b_1 은 0 내지 5.0의 실수, b_2 는 0 내지 4.0의 실수인 것이 바람직하다.

[65] 상기 확인 모듈의 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하여 고분자의 팽윤 현상을 확인하는 것은,

[66] i) 하기 식 4를 이용하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하는 단계;및

[67] ii) 상기 i)단계에서 계산한 용매-고분자 팽윤 지수 거리가 임계값(cut-off: 0보다 큰 실수)보다 크면, 계산을 종료함으로써 상기에서 계산된 용매-고분자 팽윤 지수가 고분자의 팽윤 현상을 나타내는 것을 확인하고, 임계값 보다 작거나 같으면, 상기 데이터 입력 모듈의 조정된 한센 용해도 인자를 변경하여 상기 데이터 입력 모듈 내지 확인 모듈을 반복함으로써 용매-고분자 팽윤 지수의 값을 계산하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리가 임계값 보다 큰 경우를 확인하는 단계를 포함하는 모듈 일 수 있다.

[68] [식 4]

[69] $S\text{-Distance} = | \text{Max-S-PSP} - \text{Min-S-PSP} |$

[70] 상기 식 4에서 S-PSP는 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter)를 나타내고, Max-S-PSP는 N개의 S-PSP값 중에서 최대값을 나타내고, Min-S-PSP는 N개의 S-PSP값 중에서 최소값을 나타낸다.

[71] 상기 임계값(cut-off)은 고분자의 팽윤 현상이 발생하는 범위를 나타내고, N개의 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)의 최대값의 20% 내지 40%의 값을 갖는 실수 인 것이 바람직하다.

[72] 또한, 본 명세서에서 기재한 모듈(module)이란 용어는 특정한 기능이나 동작을 처리하는 하나의 단위를 의미하며, 이는 하드웨어나 소프트웨어 또는 하드웨어 및 소프트웨어의 결합으로 구현할 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

[73] 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 특히 청구범위 기록과 균등한 의미 및 범위 내에서의 모든 변경을 포함하고 있다.

[74] 실시에

[75] 하기 실시예에 사용된 고분자 팽윤 시스템은 다음과 같다.

[76] 1.고분자: 폴리다이메틸실록세인(PolyDiMethylSiloxane:PDMS)

[77] 2.팽윤 실험에 사용한 용매: n-헥산(n-Hexane), 메틸 에틸 케톤(Methyl Ethyl Ketone: MEK), 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 아세테이트(Propylene Glycol Monomethyl Ether Acetate: PGMEA)

[78] 1. 대상 고분자에 대한 고분자 팽윤 현상 실험

[79] 고분자인 폴리다이메틸실록세인(PDMS)에 대하여 상기의 3가지 용매를 사용해서 고분자 팽윤 현상에 대한 실험을 수행하였다. 수행된 팽윤 실험은 대상 고분자 샘플을 대상 용매에 20 내지 30분 동안 담근 후에 대상 고분자의 무게 증가량을 측정하였다. 측정 결과 n-헥산(n-Hexane)의 경우가 팽윤되는 양이 가장 많았고, 프로필렌글리콜모노메틸에테르아세테이트(PGMEA)의 경우가 팽윤되는 양이 가장 적었다. 팽윤 실험 결과는 하기 [표 1]에 나타내었다.

[80] 표 1

[Table 1]

	대상 고분자인 PDMS의 상대 팽윤량
n-Hexane	1.000
MEK	0.524
PGMEA	0.255

[81] 상기 [표 1]에서 폴리다이메틸실록세인(PDMS)의 상대 팽윤량은 각 용매에 대한 고분자의 팽윤 무게 증가량을 n-헥산(n-Hexane)의 무게 증가량으로 나눈 값을 나타내었다. 따라서, n-헥산(n-Hexane)의 경우는 1.000의 값을 나타내었고, 프로필렌글리콜모노메틸에테르아세테이트(PGMEA)의 경우는 0.255의 값을 나타내었다.

[82] 2. 팽윤 실험에 사용한 N개의 용매의 용매-고분자 팽윤 지수 계산 (N=3)

[83] 상기 1.단계의 고분자 팽윤 현상 실험에 사용한 3개의 용매에 대해서 하기 [식 1] 및 [식 2]를 이용하여 용매-고분자 팽윤 지수를 계산하였다.

[84] [식 1]

[85] $S-PSP\{Ai\}=(a0x(ADJ_D\{Ai\})^{b0}+a1x(ADJ_P\{Ai\})^{b1}+a2x(ADJ_H\{Ai\})^{b2})^c$

[86] [식 2]

[87] $ADJ_D\{Ai\} = (0.5) \times \exp(D\{Ai\}/(6.0))$

$$ADJ_P\{Ai\} = (0.8) \times \exp(P\{Ai\}/(2.1))$$

$$ADJ_H\{Ai\} = (1.2) \times \exp(H\{Ai\}/(2.2))$$

$$a0=2.0, a1=3.0, a2=3.0, b0=b1=b2=2.0, c=0.5$$

[88] 하기 표 2는 상기 [식 1] 및 [식 2]으로 계산된 용매-고분자 팽윤 지수(S-PSP)의 값을 나타내었다. 용매-고분자 팽윤 지수(S-PSP)값이 증가할수록 고분자의 상대 팽윤량은 감소하는 경향을 나타내었고, 따라서 용매-고분자 팽윤 지수(S-PSP)와 고분자의 상대 팽윤량은 서로 높은 상관관계를 나타내었다. 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)와 고분자의 상대 팽윤량의 상관 관계를 나타낸 그래프로 결정 계수인 R^2 (coefficient of determinant, R-square)은 0.9902이었다.

[89] 표 2

[Table 2]

	S-PSP	대상 고분자인 PDMS의 상대 팽윤량
n-Hexane	8.833	1.000
MEK	103.365	0.524
PGMEA	180.144	0.255

[90] 3. 용매-고분자 팽윤 지수 거리 측정

[91] 상기 3개의 용매에 대해서 계산한 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 하기의 [식 4]를 사용하여 계산하였다.

[92] [식 4]

[93] $S\text{-Distance} = | \text{Max-S-PSP} - \text{Min-S-PSP} |$

[94] 계산된 S-Distance = $| 180.144 - 8.833 | = 171.311$

[95] 임계값(cut-off)을 50.0으로 설정 했을 경우, S-Distance가 임계값(cut-off)보다 큰 조건을 만족하기 때문에 상기의 방법으로 계산된 S-PSP값은 고분자의 팽윤 현상을 정량적으로 평가할 수 있는 것을 실험 결과를 통해 확인하였다.

청구범위

- [청구항 1] 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법으로,
 a) 용해시키려는 고분자에 대하여 N개의 용매를 사용하여 팽윤 현상을 실험하여 팽윤 정도를 평가하는 단계;
 b) 상기 a)단계의 팽윤 현상 실험에 사용한 N개의 용매에 대한 조정된 한센 용해도 인자를 이용하여 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)를 계산하는 단계; 및
 c) 상기 b)단계에서 용매-고분자 팽윤 지수를 계산한 N개의 용매에 대하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하여 고분자의 팽윤 현상을 확인하는 단계를 포함하는 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법.
- [청구항 2] 청구항 1에 있어서, 상기 a)단계의 고분자의 팽윤 정도는 용매가 고분자에 침투하여 팽윤되는 고분자의 부피 증가량 또는 무게 증가량을 측정하는 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법.
- [청구항 3] 청구항 2에 있어서, 상기 고분자의 팽윤 정도는 고분자의 상대 팽윤량으로 측정하고, 상기 고분자의 상대 팽윤량은 각 용매에 대한 고분자의 팽윤 무게 증가량을 N개의 용매 중 팽윤되는 양이 최대인 값으로 나눈 값인 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법.
- [청구항 4] 청구항 1에 있어서, 상기 a)단계의 N은 3 내지 20의 정수인 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법.
- [청구항 5] 청구항 1에 있어서, 상기 b)단계의 용매-고분자 팽윤 지수(S-PSP)를 계산하는 것은, 하기 식 1 내지 식 3을 이용하여 계산하는 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법.

[식 1]

$$S-PSP\{Ai\}=(a0x(ADJ_D\{Ai\})^{b0}+a1x(ADJ_P\{Ai\})^{b1}+a2x(ADJ_H\{Ai\})^{b2})^c$$

[식 2]

$$ADJ_D\{Ai\}=F(D\{Ai\}),ADJ_P\{Ai\}=F(P\{Ai\}),ADJ_H\{Ai\}=F(H\{Ai\})$$

[식 3]

$$F(X)=d0 \times \exp(X/d1) \text{ or } F(X)=d2 \times \log_{10}((X+1)/d3)$$

상기 식 1에서 Ai는 고분자 팽윤 실험에 사용한 N개의 용매 중 i번째 용매를 나타내고, a0, a1, a2는 실수이고, b0, b1, b2는

실수이고, c 는 실수이다. 상기 식 2에서 $ADJ_D\{A_i\}$, $ADJ_P\{A_i\}$, $ADJ_H\{A_i\}$ 는 각각 조정된 한센 용해도 인자를 나타내고, 임의의 용매 A_i 에 대한 $D\{A_i\}$, $P\{A_i\}$, $H\{A_i\}$ 는 각각 무극성 분산 결합으로 인해 발생하는 용해도 인자, 영구 쌍극자로 인한 극성결합으로 인해 발생하는 용해도 인자, 수소결합으로 인해 발생하는 용해도 인자를 나타낸다. 상기 식 3에서 $F(X)$ 는 용매 A_i 의 한센 용해도 인자를 조정하는 함수를 나타내는 것으로, d_0 , d_1 , d_2 , d_3 는 실수이다.

[청구항 6]

청구항 5에 있어서, 상기 b_0 는 0 내지 3.5의 실수, b_1 은 0 내지 5.0의 실수, b_2 는 0 내지 4.0의 실수인 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법.

[청구항 7]

청구항 1에 있어서, 상기 c)단계의 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하여 고분자의 팽윤 현상을 확인하는 것은,

i) 하기 식 4를 이용하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하는 단계; 및

ii) 상기 i)단계에서 계산한 용매-고분자 팽윤 지수 거리가 임계값(cut-off: 0보다 큰 실수)보다 크면, 계산을 종료함으로써 상기에서 계산된 용매-고분자 팽윤 지수가 고분자의 팽윤 현상을 나타내는 것을 확인하고, 임계값 보다 작거나 같으면, 상기 b)단계의 조정된 한센 용해도 인자를 변경하여 상기 b)단계 내지 c)단계를 반복함으로써 용매-고분자 팽윤 지수의 값을 계산하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리가 임계값 보다 큰 경우를 확인하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법.

[식 4]

$$S\text{-Distance} = | \text{Max-S-PSP} - \text{Min-S-PSP} |$$

상기 식 4에서 S-PSP는 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter)를 나타내고, Max-S-PSP는 N개의 S-PSP값 중에서 최대값을 나타내고, Min-S-PSP는 N개의 S-PSP값 중에서 최소값을 나타낸다.

[청구항 8]

청구항 7에 있어서, 상기 임계값(cut-off)은 N개의 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)의 최대값의 20% 내지 40%의 값을 갖는 실수 인 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 방법.

[청구항 9]

용해시키려는 고분자에 대하여 N개의 용매를 사용하여 팽윤 현상을 실험하여 팽윤 정도를 평가하여 데이터를 입력받는 평가

모듈;

상기 평가 모듈의 팽윤 현상 실험에 사용한 N개의 용매에 대한
조정된 한센 용해도 인자를 이용하여 용매-고분자 팽윤

지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)를 계산하여

데이터를 입력받는 데이터 입력 모듈; 및

상기 데이터 입력 모듈에서 용매-고분자 팽윤 지수를 계산한

N개의 용매에 대하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를

계산하여 고분자의 팽윤 현상을 확인하여 데이터를 입력받는 확인

모듈을 포함하는 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는

시스템.

[청구항 10]

청구항 9에 있어서, 상기 평가 모듈의 고분자의 팽윤 정도는

용매가 고분자에 침투하여 팽윤되는 고분자의 부피 증가량 또는

무게 증가량을 측정하는 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상

평가 지수를 계산하는 시스템.

[청구항 11]

청구항 10에 있어서, 상기 고분자의 팽윤 정도는 고분자의 상대

팽윤량으로 측정하고, 상기 고분자의 상대 팽윤량은 각 용매에

대한 고분자의 팽윤 무게 증가량을 N개의 용매 중 팽윤되는 양이

최대인 값으로 나눈 값인 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상

평가 지수를 계산하는 시스템.

[청구항 12]

청구항 9에 있어서, 상기 평가 모듈의 N은 3 내지 20의 정수인 것을

특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 시스템.

[청구항 13]

청구항 9에 있어서, 상기 데이터 입력 모듈의 용매-고분자 팽윤

지수(S-PSP)를 계산하는 것은, 하기 식 1 내지 식 3을 이용하여

계산하는 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를
계산하는 시스템.

[식 1]

$$S-PSP\{Ai\}=(a0x(ADJ_D\{Ai\})^{b0}+a1x(ADJ_P\{Ai\})^{b1}+a2x(ADJ_H\{Ai\})^{b2})^c$$

[식 2]

$$ADJ_D\{Ai\}=F(D\{Ai\}),ADJ_P\{Ai\}=F(P\{Ai\}),ADJ_H\{Ai\}=F(H\{Ai\})$$

[식 3]

$$F(X)=d0 \times \exp(X/d1) \text{ or } F(X)=d2 \times \log_{10}((X+1)/d3)$$

상기 식 1에서 Ai는 고분자 팽윤 실험에 사용한 N개의 용매 중

i번째 용매를 나타내고, a0, a1, a2는 실수이고, b0, b1, b2는

실수이고, c는 실수이다. 상기 식 2에서 ADJ_D{Ai}, ADJ_P{Ai},

ADJ_H{Ai}는 각각 조정된 한센 용해도 인자를 나타내고, 임의의

용매 Ai에 대한 D{Ai}, P{Ai}, H{Ai}는 각각 무극성 분산 결합으로

인해 발생하는 용해도 인자, 영구 쌍극자로 인한 극성결합으로 인해 발생하는 용해도 인자, 수소결합으로 인해 발생하는 용해도 인자를 나타낸다. 상기 식 3에서 $F(X)$ 는 용매 A_i 의 한센 용해도 인자를 조정하는 함수를 나타내는 것으로, d_0, d_1, d_2, d_3 은 실수이다.

[청구항 14]

청구항 13에 있어서, 상기 b_0 는 0 내지 3.5의 실수, b_1 은 0 내지 5.0의 실수, b_2 는 0 내지 4.0의 실수인 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 시스템.

[청구항 15]

청구항 9에 있어서, 상기 확인 모듈의 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하여 고분자의 팽윤 현상을 확인하는 것은,

i) 하기 식 4를 이용하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리(S-Distance)를 계산하는 단계; 및

ii) 상기 i) 단계에서 계산한 용매-고분자 팽윤 지수 거리가 임계값(cut-off: 0보다 큰 실수)보다 크면, 계산을 종료함으로써 상기에서 계산된 용매-고분자 팽윤 지수가 고분자의 팽윤 현상을 나타내는 것을 확인하고, 임계값 보다 작거나 같으면, 상기 데이터 입력 모듈의 조정된 한센 용해도 인자를 변경하여 상기 데이터 입력 모듈 내지 확인 모듈을 반복함으로써 용매-고분자 팽윤 지수의 값을 계산하여 용매-고분자 팽윤 지수 거리가 임계값 보다 큰 경우를 확인하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 시스템.

[식 4]

$$S\text{-Distance} = | \text{Max-S-PSP} - \text{Min-S-PSP} |$$

상기 식 4에서 S-PSP는 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter)를 나타내고, Max-S-PSP는 N개의 S-PSP값 중에서 최대값을 나타내고, Min-S-PSP는 N개의 S-PSP값 중에서 최소값을 나타낸다.

[청구항 16]

청구항 15에 있어서, 상기 임계값(cut-off)은 N개의 용매-고분자 팽윤 지수(Solvent-Polymer Swelling Parameter: S-PSP)의 최대값의 20% 내지 40%의 값을 갖는 실수 인 것을 특징으로 하는, 고분자의 팽윤 현상 평가 지수를 계산하는 시스템.

[Fig. 1]

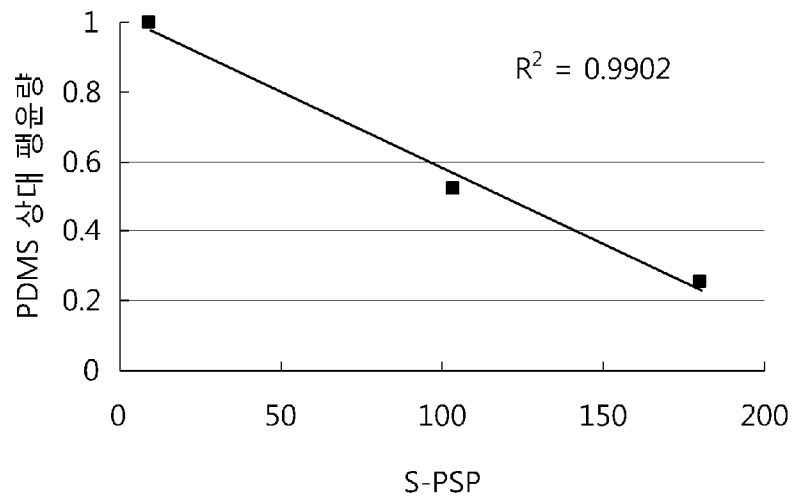


FIG. 1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2014/007566**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER****G06F 19/00(2011.01)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; G01N; H01L; G01H

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: solvent, polymer, swelling, Hansen, solubility

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2011-214978 A (KAGAWA INDUSTRY SUPPORT FOUNDATION) 27 October 2011 [0001-0003], claim 1, abstract, figure 1	1-16
A	JP 2006-322791 A (YAMAGUCHI UNIV.) 30 November 2006 [0006], claim 1, abstract, figure 1	1-16
A	JP 2811225 B2 (AIDA, Tetsuo) 15 October 1998 Claim 1, figure 1	1-16



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

17 NOVEMBER 2014 (17.11.2014)

Date of mailing of the international search report

18 NOVEMBER 2014 (18.11.2014)

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/KR2014/007566

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
JP 2011-214978 A	27/10/2011	NONE	
JP 2006-322791 A	30/11/2006	JP 4370405 B2	25/11/2009
JP 2811225 B2	15/10/1998	JP 4-55739 A	24/02/1992

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

G06F 19/00(2011.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

G06F; G01N; H01L; G01H

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: 용매, 고분자, 팽윤, 한센, 용해도

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	JP 2011-214978 A (KAGAWA INDUSTRY SUPPORT FOUNDATION) 2011.10.27 [0001-0003], claim 1, abstract, figure 1	1-16
A	JP 2006-322791 A (YAMAGUCHI UNIV.) 2006.11.30 [0006], claim 1, abstract, figure 1	1-16
A	JP 2811225 B2 (AIDA TETSUO) 1998.10.15 claim 1, figure 1	1-16

☐ 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

2014년 11월 17일 (17.11.2014)

국제조사보고서 발송일

2014년 11월 18일 (18.11.2014)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소

 대한민국 특허청
(302-701) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-472-7140

심사관

김동성

전화번호 +82-42-481-8519



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
JP 2011-214978 A	2011/10/27	없음	
JP 2006-322791 A	2006/11/30	JP 4370405 B2	2009/11/25
JP 2811225 B2	1998/10/15	JP 4-55739 A	1992/02/24