(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2021-0100465
(43) 공개일자 2021년08월17일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C40B 30/10 (2006.01) *B01J 31/16* (2006.01)
H01M 12/08 (2015.01)
(52) CPC특허분류
C40B 30/10 (2013.01)
B01J 31/1691 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2020-0014476
(22) 출원일자 2020년02월06일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
숙명여자대학교산학협력단
서울특별시 용산구 청파로47길 100 (청파동2가, 숙명여자대학교)
세종대학교산학협력단
서울특별시 광진구 능동로 209 (군자동, 세종대학교)
(72) 발명자
류원희
서울특별시 용산구 청파로47길 100 (청파동2가, 숙명여자대학교)
김종순
서울특별시 용산구 백범로90길 74, 103동 1006호 (문배동, 이안용산)
(74) 대리인
양성보

전체 청구항 수 : 총 7 항

(54) 발명의 명칭 **제1원리계산법을 이용한 전해액촉매 발굴방법 및 촉매를 포함하는 리튬공기전지**

(57) 요 약

제1원리계산법을 이용한 전해액촉매 발굴방법 및 촉매를 포함하는 리튬공기전지를 개시한다. 일실시예에 따른 전해액촉매 발굴방법은 제1원리계산(first principles calculation)을 통해 적어도 하나의 금속 유기체의 기존상태와 산화상태 각각의 최고피점궤도(highest occupied molecular orbital, HOMO) 및 최저공궤도(lowest unoccupied molecular orbital, LUMO)의 수치를 예측하는 단계, 상기 예측된 수치를 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압 및 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압과 비교하는 단계 및 상기 비교의 결과에 기반하여 상기 전해질 용매를 위한 용해성촉매로서의 금속 유기체를 결정하는 단계를 포함할 수 있다.

대 표 도 - 도1

100

금속 유기체 (기본상태)		HOMO	LUMO	금속 유기체 (산화상태)		HOMO	LUMO
Co_Standard	a	-4.90097	-2.74885	Co_Oxi	a	-6.19676	-5.37417
	b	-6.36927	-4.31947		b	-6.19676	-5.37417
Cu_Standard	a	-5.3524	- 3.17988	Cu_Oxi	a	-6.25172	-5.29308
	b	-5.36655	-3.16083		b	-6.25172	-5.29308
Mn_Standard	a	-5.27322	-3.00926	Mn_Oxi	a	-6.28356	-5.05879
	b	-5.329	-2.95185		b	-6.28356	-5.05879
Fe_Standard	a	-5.35376	-3.78314	Fe_Oxi	a	-7.39921	-5.27566
	b	-5.35376	-3.78314		b	-6.30206	-4.25879
Ni_Standard	a	-5.35675	-3.13253	Ni_Oxi	a	-6.34751	-4.00491
	b	-5.35675	-3.13253		b	-7.55458	-5.23294
Ti_Standard	a	-4.66426	-3.24709	Ti_Oxi	a	-6.01798	-4.12274
	b	-4.66423	-3.24709		b	-5.94505	-4.08328
Zn_Standard	a	-5.31648	-3.13416	Zn_Oxi	a	-6.30506	-4.01063
	b	-5.31648	-3.13416		b	-7.7837	-5.19839

(52) CPC특허분류
H01M 12/08 (2019.01)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 1711098199
과제번호 2019M3D1A2104105
부처명 과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명 한국연구재단
연구사업명 미래소재디스커버리지원(소재융합혁신기술개발)
연구과제명 대기분위기 작동 가능한 금속-공기전지용 고활성 촉매소재 개발
기 여 율 1/3
과제수행기관명 숙명여자대학교
연구기간 2019.09.27 ~ 2022.12.31
이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 1711106051
과제번호 2019R1C1C1007886
부처명 과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명 한국연구재단
연구사업명 신진연구지원사업
연구과제명 자연 추출 포피린소재를 이용한 온실가스저감용 친환경 이차전지 개발
기 여 율 1/3
과제수행기관명 숙명여자대학교산학협력단
연구기간 2019.03.01 ~ 2023.02.28
이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 1711115282
과제번호 2018R1A5A1025224
부처명 과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명 한국연구재단
연구사업명 선도연구센터지원사업
연구과제명 인공지능 활용 이오닉스 기반 소재개발 플랫폼 연구센터
기 여 율 1/3
과제수행기관명 전남대학교산학협력단
연구기간 2018.08.01 ~ 2025.02.28

명 세 서

청구범위

청구항 1

제1원리계산(first principles calculation)을 통해 금속 유기체의 기존상태와 산화상태 각각의 최고피점궤도(highest occupied molecular orbital, HOMO) 및 최저공궤도(lowest unoccupied molecular orbital, LUMO)의 수치를 예측하는 단계;

상기 예측된 수치를 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압 및 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압과 비교하는 단계; 및

상기 비교의 결과에 기반하여 상기 전해질 용매를 위한 용해성촉매로서의 금속 유기체를 결정하는 단계

를 포함하는 전해액촉매 발굴방법.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 비교하는 단계는,

상기 금속 유기체의 기존상태에서의 최고피점궤도의 수치 및 상기 금속 유기체의 산화상태에서의 최저공궤도의 수치를 상기 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압의 범위를 비교하고, 상기 금속 유기체의 산화상태에서의 최고피점궤도의 수치와 상기 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압의 범위를 비교하는 것을 특징으로 하는 전해액촉매 발굴방법.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 결정하는 단계는,

상기 금속 유기체의 기존상태에서의 최고피점궤도의 수치 및 상기 금속 유기체의 산화상태에서의 최저공궤도의 수치가 상기 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압의 범위에 가까운 정도에 기반하여 금속 유기체를 결정하는 것을 특징으로 하는 전해액촉매 발굴방법.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 결정하는 단계는,

상기 금속 유기체의 산화상태에서의 최고피점궤도의 수치가 상기 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압의 범위보다 큰 정도에 기반하여 금속 유기체를 결정하는 것을 특징으로 하는 전해액촉매 발굴방법.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 금속 유기체는 코발트(Co), 구리(Cu), 망간(Mn), 철(Fe), 니켈(Ni), 티타늄(Ti) 및 아연(Zn)로 구성된 군으로부터 선택되는 금속을 중심금속으로 포함하는 유기체를 포함하는 것을 특징으로 하는 전해액촉매 발굴방법.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 금속 유기체는 금속을 중심금속으로 포함하는 프탈로사이아닌(phthalocyanine)을 포함하는 것을 특징으로 하는 전해액촉매 발굴방법.

청구항 7

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항의 전해액촉매 발굴방법에 의해 결정된 금속 유기체를 전해액촉매로 사용하는 리튬 전지.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 아래의 설명은 제1원리계산법을 이용한 전해액촉매 발굴방법 및 촉매를 포함하는 리튬공기전지에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 산업기술이 발전됨에 따라 화석연료의 소비가 빠르게 증가하였고, 이에 따른 이산화탄소의 배출 저감을 위하여 전기자동차(Electrical Vehicles) 및 하이브리드 자동차(Hybrid Vehicles)의 보급 역시 확대되고 있다. 현재의 리튬-이온전지(Lithium-ion battery)는 전지 용량의 제약에 의해 전기자동차의 장거리 주행을 가능하지 않게 하고, 용량을 충당하기 위해 다수의 전지의 패킹하여 사용할 경우 자동차의 무게 증가뿐만 아니라 판매가격의 상승을 초래하기 때문에 전기자동차의 상용화용으로 활용하기에는 적합하지 않다. 전기자동차의 가솔린 기반 자동차에 준하는 장거리 운행을 위해서는 대용량의 전지가 전기자동차에 탑재되어야 하며, 기존의 전지에 비해 5배 이상의 큰 에너지 밀도를 갖는 이차전지가 요구된다.

[0003] 이에 따라 리튬이온전지보다 큰 에너지 밀도를 갖는 리튬공기전지가 주목받고 있다. 리튬공기전지는 리튬이온전지와 달리 양극에 대기 중의 산소를 활물질(활물질: 전지가 방전할 때 화학적으로 반응하여 전기에너지를 생산하는 물질)로 사용하므로 원료 수급 측면에서도 유리한 이점이 있다.

[0004] 이러한 리튬공기전지는 원활한 산소의 이동을 위하여 다공질 탄소(Porous carbon)로 구성된 양극을 주로 사용하며, 방전 시 리튬이온이 음극에서 공기극으로 이동하여 산소와 전자가 함께 반응하는 산소환원반응($2Li^+ + O_2 + 2e^- \rightarrow Li_2O_2$, Oxygen reduction reaction, ORR) 을 통하여 전기를 생산하고, 이 때의 표준전압은 Nernst 공식에 의해 열역학적으로 2.96V 에서 반응이 일어나게 된다. 반대로 외부에서 이러한 표준전압보다 높은 전압을 걸어주면 역반응인 산소발생반응($Li_2O_2 \rightarrow 2Li^+ + O_2 + 2e^-$, Oxygen Evolution Reaction, OER)이 음극에서 일어나게 되어 충전이 이루어진다.

[0005] 그러나, 리튬공기전지는 반응생성물인 고상의 리튬산화물(Li_2O_2)이 가역적으로 분해되지 않고 전극 표면에 축적되어 미세 기공(pores)을 막음으로써 반응 비표면적이 줄어들게 되거나 전해질 및 산소의 유입이 막혀, 전극의 충방전에 필요한 전압이 증가(Overpotential)되는 것과 같은 근본적인 문제점을 가지고 있다. 즉, 리튬공기전지를 충전하기 위해서 표준 전압보다 훨씬 높은 과전압이 걸려야 하며, 이는 결국 에너지 손실을 초래하게 된다.

[0006] 한편, 제1원리계산법(first principles calculation)은 양자역학에 기반한 계산 방법으로, 물질의 성질을 원자들의 위치와 종류를 제외한 다른 경험적인 수치의 도움 없이 계산하는 방법이다. 이런 특성 때문에 현실적인 물리량을 계산할 수 있어, 실험 결과와의 직접적인 비교가 용이할 뿐만 아니라, 예측능력을 가지고 있는 방법이다. 양자역학은 20세기에 정립되어, 수많은 실험을 통해 검증된 방법으로, 슈뢰딩거의 파동방정식에 의해 전자의 거동을 계산할 수 있음이 알려져 있다. 하지만 고체 내의 수많은 상호작용하는 전자를 기술하기 위해서는 이 방법은 한계를 가지고 있으며, 실제적인 활용은 독립된 원자의 상태를 계산하거나 몇몇 원자들로 구성된 간단한 분자의 양자상태를 계산하는 범위로 제한되어 있다. 고체의 상태의 기술하기 위해서는 상호작용하는 전자들의 다체적인 슈뢰딩거 파동방정식을 계산하는 대신에, 상호작용하지 않는 준입자(quasiparticle)의 거동을 기술하는 밀도범함수이론(density functional theory)이 주로 쓰이고 있다.

[0007] 선행기술문헌

[0008] (특허문헌 0001) 대한민국 공개특허 제10-2017-0089122호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0009] 제1원리계산(first principles calculation)을 통해 용해성촉매의 기존상태와 산화상태 각각의 최고피점궤도(highest occupied molecular orbital, HOMO)와 최저공궤도(lowest unoccupied molecular orbital, LUMO) 수치를 예측하여 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압 및 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압과 비교함으로써 리튬전지에 적합한 용해성촉매를 발견할 수 있는 제1원리계산법을 이용한 전해액촉매 발굴방법을 제공한다.

[0010] 상기 전해액촉매 발굴방법을 통해 발견된 용해성촉매를 포함하는 리튬전지를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0011] 제1원리계산(first principles calculation)을 통해 금속 유기체의 기존상태와 산화상태 각각의 최고피점궤도(highest occupied molecular orbital, HOMO) 및 최저공궤도(lowest unoccupied molecular orbital, LUMO)의 수치를 예측하는 단계; 상기 예측된 수치를 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압 및 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압과 비교하는 단계; 및 상기 비교의 결과에 기반하여 상기 전해질 용매를 위한 용해성촉매로서의 금속 유기체를 결정하는 단계를 포함하는 전해액촉매 발굴방법을 제공한다.

[0012] 일측에 따르면, 상기 비교하는 단계는, 상기 금속 유기체의 기존상태에서의 최고피점궤도의 수치 및 상기 금속 유기체의 산화상태에서의 최저공궤도의 수치를 상기 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압의 범위를 비교하고, 상기 금속 유기체의 산화상태에서의 최고피점궤도의 수치와 상기 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압의 범위를 비교하는 것을 특징으로 할 수 있다.

[0013] 다른 측면에 따르면, 상기 결정하는 단계는, 상기 금속 유기체의 기존상태에서의 최고피점궤도의 수치 및 상기 금속 유기체의 산화상태에서의 최저공궤도의 수치가 상기 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압의 범위에 가까운 정도에 기반하여 금속 유기체를 결정하는 것을 특징으로 할 수 있다.

[0014] 또 다른 측면에 따르면, 상기 결정하는 단계는, 상기 금속 유기체의 산화상태에서의 최고피점궤도의 수치가 상기 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압의 범위보다 큰 정도에 기반하여 금속 유기체를 결정하는 것을 특징으로 할 수 있다.

[0015] 또 다른 측면에 따르면, 상기 금속 유기체는 코발트(Co), 구리(Cu), 망간(Mn), 철(Fe), 니켈(Ni), 티타늄(Ti) 및 아연(Zn)로 구성된 군으로부터 선택되는 금속을 중심금속으로 포함하는 유기체를 포함하는 것을 특징으로 할 수 있다.

[0016] 또 다른 측면에 따르면, 상기 금속 유기체는 금속을 중심금속으로 포함하는 프탈로사이아닌(phthalocyanine)을 포함하는 것을 특징으로 할 수 있다.

[0017] 상기 전해액촉매 발굴방법에 의해 결정된 금속 유기체를 전해액촉매로 사용하는 리튬 전지를 제공한다.

발명의 효과

[0018] 제1원리계산(first principles calculation)을 통해 용해성촉매의 기존상태와 산화상태 각각의 최고피점궤도(highest occupied molecular orbital, HOMO)와 최저공궤도(lowest unoccupied molecular orbital, LUMO) 수치를 예측하여 리튬페록사이드(Li2O2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압 및 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압과 비교함으로써 리튬공기전지에 적합한 용해성촉매를 발견할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0019] 도 1은 본 발명의 일실시예에 있어서, 제1원리계산을 통해 예측된 다양한 용해성촉매들의 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO) 수치를 나타난 도면이다.

도 2는 본 발명의 일실시예에 있어서, 용해성촉매들의 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO)와 전해질 용매의 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO)를 나타낸 그래프이다.

도 3은 본 발명의 일실시예에 따른 금속 유기체들의 예를 도시한 도면이다.

도 4 내지 도 6은 본 발명의 일실시예들에 있어서, 금속 유기체들이 원자단위 구조적 변형 없이 전자를 제공할

수 있음을 나타낸 도면이다.

도 7은 본 발명의 일실시예에 있어서, 철 프탈로사이아닌의 산화 시 전하 변화의 예를 도시한 도면이다.

도 8은 본 발명의 일실시예에 있어서, 아연 프탈로사이아닌의 산화 시 전하 변화의 예를 도시한 도면이다.

도 9는 본 발명의 일실시예에 따른 컴퓨터 장치의 예를 도시한 도면이다.

도 10은 본 발명의 일실시예에 따른 전해액촉매 발굴방법의 예를 도시한 흐름도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0020] 본 발명은 다양한 변환을 가할 수 있고 여러 가지 실시예를 가질 수 있는 바, 이하에서는 특정 실시예들이 첨부된 도면을 기초로 상세히 설명하고자 한다.

[0021] 본 발명을 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다.

[0022] 리튬공기전지용 용해성촉매의 경우 촉매의 원자단위 구조적 변형 없이 전자를 제공하면서 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 분해를 쉽게 도와줄 수 있어야 한다. 동시에, 전자가 빠진 산화상태의 용해성촉매의 반응성이 용해성촉매가 포함된 전해질 용매의 분해를 일으킬 만큼 높지 않아서 리튬공기전지의 구동 중 전해질 용매가 안정적으로 유지될 수 있어야 한다.

[0023] 이를 위해, 본 발명의 실시예들에서는 제1원리계산(first principles calculation)을 통해 용해성촉매의 기존상태와 산화상태 각각의 최고피점궤도(highest occupied molecular orbital, HOMO)와 최저공궤도(lowest unoccupied molecular orbital, LUMO) 수치를 예측하여 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압 및 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압과 비교함으로써 리튬공기전지에 적합한 용해성촉매를 발견할 수 있다.

[0024] 도 1은 본 발명의 일실시예에 있어서, 제1원리계산을 통해 예측된 다양한 용해성촉매들의 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO) 수치를 나타난 도면이다. 도 1의 표(100)에서 "_Standard"는 해당 금속을 포함하는 용해성촉매로서의 금속 유기체(metal organic)가 기존상태임을, "_Oxi"는 해당 금속을 포함하는 용해성촉매로서의 금속 유기체(metal organic)가 산화상태임을 각각 나타낼 수 있다. 예를 들어, "Co_Standard"는 코발트(Co)를 포함하는 용해성촉매로서의 금속 유기체가 기존상태임을, "Co_Oxi"는 코발트(Co)를 포함하는 용해성촉매로서의 금속 유기체가 산화상태임을 각각 나타낼 수 있다.

[0025] 이때, 도 1의 실시예에서는 용해성촉매로서의 금속 유기체들로서 코발트(Co), 구리(Cu), 망간(Mn), 철(Fe), 니켈(Ni), 티타늄(Ti) 및 아연(Zn) 각각을 포함하는 프탈로사이아닌(phthalocyanine)이 사용되었다. 다시 말해, 표 1(100)에서는 다양한 금속과 결합된 프탈로사이아닌들의 기존상태와 산화상태 각각에서의 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO) 수치를 나타내고 있다. 이미 설명한 바와 같이, 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO) 수치는 제1원리계산을 통해 예측될 수 있다.

[0026] 이와 유사하게, 전해질 용매에 대해서도 제1원리계산을 통해 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO) 수치가 예측될 수 있다. 이때, 용해질촉매의 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO) 수치와 전해질 용매의 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO) 수치간의 비교를 통해 리튬공기전지를 위해 적합한 용해성촉매가 탐색될 수 있다.

[0027] 도 2는 본 발명의 일실시예에 있어서, 용해성촉매들의 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO)와 전해질 용매의 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO)를 나타낸 그래프이다. 도 2의 그래프(200)는 코발트(Co), 구리(Cu), 망간(Mn), 철(Fe), 니켈(Ni), 티타늄(Ti) 및 아연(Zn) 각각을 포함하는 용해성촉매로서의 금속 유기체들의 기존상태와 산화상태 각각에서의 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO)를 나타내고 있다. 또한, 그래프(200)는 TEGDME(Tetraethylene glycol dimethyl ether)가 혼합된 전해질 용매의 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO)를 나타내고 있다.

[0028] 이미 설명한 바와 같이, 리튬공기전지용 용해성촉매의 경우, 촉매의 원자단위 구조적 변형 없이 전자를 제공하면서 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 분해를 쉽게 도와줄 수 있어야 한다. 이때, 용해성촉매의 최고피점궤도(HOMO) 에너지 레벨은 산화환원 중재자(Redox Mediator, RM)의 산화환원 전위(redox potential)에 대응할 수 있다. 그래프(200)는 리튬페록사이드(Li_2O_2)와 반응하는데 필요한 전위 범위(210)를 나타내고 있으며, 본 실시예에 따른

용해성촉매로서의 금속 유기체들의 최고점궤도(HOMO) 에너지 레벨이 이러한 전위 범위(210)에 가깝게 나타남을 알 수 있다.

[0029] 또한, 이미 설명한 바와 같이, 전자가 빠진 산화상태의 용해성촉매의 반응성이 용해성촉매가 포함된 전해질 용매의 분해를 일으킬 만큼 높지 않아서 리튬공기전지의 구동 중 전해질 용매가 안정적으로 유지될 수 있어야 한다. 앞서 도 2의 그래프(200)는 TEGDME가 혼합된 전해질 용매와 반응하여 전해질 용매를 분해시킬 수 있는 촉매의 상대적으로 불안정한 전위 범위(220)를 나타내고 있으며, 본 실시예에 따른 전자가 빠진 산화상태의 용해성촉매로서의 금속 유기체들의 최고점궤도(HOMO) 에너지 레벨이 TEGDME가 혼합된 전해질 용매의 최고점궤도(HOMO) 에너지 레벨보다 크다는 것을 나타내고 있다.

[0030] 다시 말해, 본 실시예에서는 최고점궤도(HOMO) 에너지 레벨이 리튬페록사이드(Li_2O_2)와 반응하는데 필요한 전위 범위(210)에 가까우면서 전자가 빠진 산화상태에서의 최고점궤도(HOMO) 에너지 레벨이 전해질 용매를 분해시킬 수 있는 전위 범위(220)보다 큰 값을 보이는 용해성촉매, 다시 말해 특정 전해질 용매를 사용하는 리튬공기전지에 적합한 용해성촉매를 제1원리계산을 통해 예측할 수 있게 된다.

[0031] 도 3은 본 발명의 일실시예에 따른 금속 유기체들의 예를 도시한 도면이다. 도 3은 전이금속 이온에 따른 포피린계 유기/무기 복합소재 촉매들의 예로서, 코발트 프탈로사이아닌(Cobalt phthalocyanine), 구리 프탈로사이아닌(Copper phthalocyanine), 철 프탈로사이아닌(Iron phthalocyanine), 니켈 프탈로사이아닌(Nickel phthalocyanine), 망간 프탈로사이아닌(Manganese phthalocyanine), 티타닐 프탈로사이아닌(Titanyl phthalocyanine) 및 바나딜 프탈로사이아닌(Vanadyl phthalocyanine)을 나타내고 있다.

[0032] 도 4 내지 도 6은 본 발명의 일실시예들에 있어서, 금속 유기체들이 원자단위 구조적 변형 없이 전자를 제공할 수 있음을 나타낸 도면들이다. 도 4는 코발트 프탈로사이아닌(Cobalt phthalocyanine)의 산화 전 상태(Cobalt (Ⅱ) phthalocyanine)와 전자가 빠진 산화상태(Cobalt (Ⅲ) phthalocyanine)의 원자단위 구조를 나타내고 있다. 또한, 도 5는 구리 프탈로사이아닌(Copper phthalocyanine)의 산화 전 상태(Copper (Ⅱ) phthalocyanine)와 전자가 빠진 산화상태(Copper (Ⅲ) phthalocyanine)의 원자단위 구조를 나타내고 있으며, 도 6은 철 프탈로사이아닌(Iron phthalocyanine)의 산화 전 상태(Iron (Ⅱ) phthalocyanine)와 전자가 빠진 산화상태(Iron (Ⅲ) phthalocyanine)의 원자단위 구조를 나타내고 있다. 이때, 도 4 내지 도 6 각각에서는 금속 유기체의 중심금속에서 전자가 빠져 산화상태가 되더라도 유기체의 구조적 변형이 없음을 보여주고 있다. 여기서 유기체의 구조적 변형이 없다는 것은 중심금속에서 전자가 빠져나가더라도 유기체의 구조가 깨지지 않고 유지됨을 의미할 수 있다.

[0033] 도 7은 본 발명의 일실시예에 있어서, 철 프탈로사이아닌의 산화 시 전하 변화의 예를 도시한 도면이고, 도 8은 본 발명의 일실시예에 있어서, 아연 프탈로사이아닌의 산화 시 전하 변화의 예를 도시한 도면이다. 도 7에서는 철 프탈로사이아닌(Iron phthalocyanine)의 산화 전 상태(Iron (Ⅱ) phthalocyanine)와 전자가 빠진 산화상태(Iron (Ⅲ) phthalocyanine)에서의 원자 각각의 전하 밀도(charge density)를 나타내고 있으며, 도 8에서는 아연 프탈로사이아닌(Zinc phthalocyanine)의 산화 전 상태(Zinc (Ⅱ) phthalocyanine)와 전자가 빠진 산화상태(Zinc (Ⅲ) phthalocyanine)에서의 원자 각각의 전하 밀도를 나타내고 있다.

[0034] 이러한 도 4 내지 도 8에서는 금속 유기체들의 산화에 의해 중심금속에서 전자가 빠지더라도 금속 유기체들을 구성하는 원자들에 대해 전하 밀도의 분포만 바뀔 뿐, 금속 유기체의 구조가 안정적으로 유지될 수 있음을 나타내고 있다.

[0035] 이처럼, 본 발명의 실시예들에 따르면, 제1원리계산을 통해 용해성촉매의 기존상태와 산화상태 각각의 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO) 수치를 예측하여 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원 전압 및 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압과 비교함으로써, 리튬공기전지에 적합한 용해성촉매를 발견할 수 있다. 또한, 전해질 용매로서 TEGDME만을 설명하였으나, 어떠한 전해질 용매를 사용하건 해당 전해질 용매에 알맞은 용해성촉매를 발견할 수 있다. 예를 들어, 다이메틸설폭시화물(dimethyl sulfoxide, DMSO)을 전해질 용매로 사용하는 경우에도 용해성촉매에 대해 예측된 최고피점궤도(HOMO)와 최저공궤도(LUMO) 수치를 DMSO가 포함된 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압과 비교함으로써, DMSO를 사용하는 리튬전지에 적합한 용해성촉매를 발견할 수 있게 된다.

[0036] 도 9는 본 발명의 일실시예에 따른 컴퓨터 장치의 예를 도시한 도면이고, 도 10은 본 발명의 일실시예에 따른 전해액촉매 발굴방법의 예를 도시한 흐름도이다.

[0037] 도 9에 도시된 컴퓨터 장치(900)는 메모리(910), 프로세서(920), 통신 인터페이스(930) 그리고 입출력 인터페이스(940)를 포함할 수 있다. 메모리(910)는 컴퓨터에서 판독 가능한 기록매체로서, RAM(random access memory), ROM(read only memory) 및 디스크 드라이브와 같은 비소멸성 대용량 기록장치(permanent mass storage device)를 포함할 수 있다. 여기서 ROM과 디스크 드라이브와 같은 비소멸성 대용량 기록장치는 메모리(910)와는 구분되는 별도의 영구 저장 장치로서 컴퓨터 장치(900)에 포함될 수도 있다. 또한, 메모리(910)에는 운영체제와 적어도 하나의 프로그램 코드가 저장될 수 있다. 이러한 소프트웨어 구성요소들은 메모리(910)와는 별도의 컴퓨터에서 판독 가능한 기록매체로부터 메모리(910)로 로딩될 수 있다. 이러한 별도의 컴퓨터에서 판독 가능한 기록매체는 플로피 드라이브, 디스크, 테이프, DVD/CD-ROM 드라이브, 메모리 카드 등의 컴퓨터에서 판독 가능한 기록매체를 포함할 수 있다. 다른 실시예에서 소프트웨어 구성요소들은 컴퓨터에서 판독 가능한 기록매체가 아닌 통신 인터페이스(930)를 통해 메모리(910)에 로딩될 수도 있다. 예를 들어, 소프트웨어 구성요소들은 네트워크(960)를 통해 수신되는 파일들에 의해 설치되는 컴퓨터 프로그램에 기반하여 컴퓨터 장치(900)의 메모리(910)에 로딩될 수 있다.

[0038] 프로세서(920)는 기본적인 산술, 로직 및 입출력 연산을 수행함으로써, 컴퓨터 프로그램의 명령을 처리하도록 구성될 수 있다. 명령은 메모리(910) 또는 통신 인터페이스(930)에 의해 프로세서(920)로 제공될 수 있다. 예를 들어 프로세서(920)는 메모리(910)와 같은 기록 장치에 저장된 프로그램 코드에 따라 수신되는 명령을 실행하도록 구성될 수 있다.

[0039] 통신 인터페이스(930)은 네트워크(960)를 통해 컴퓨터 장치(900)가 다른 장치(일례로, 앞서 설명한 저장 장치들)와 서로 통신하기 위한 기능을 제공할 수 있다. 일례로, 컴퓨터 장치(900)의 프로세서(920)가 메모리(910)와 같은 기록 장치에 저장된 프로그램 코드에 따라 생성한 요청이나 명령, 데이터, 파일 등이 통신 인터페이스(930)의 제어에 따라 네트워크(960)를 통해 다른 장치들로 전달될 수 있다. 역으로, 다른 장치로부터의 신호나 명령, 데이터, 파일 등이 네트워크(960)를 거쳐 컴퓨터 장치(900)의 통신 인터페이스(930)를 통해 컴퓨터 장치(900)로 수신될 수 있다. 통신 인터페이스(930)를 통해 수신된 신호나 명령, 데이터 등은 프로세서(920)나 메모리(910)로 전달될 수 있고, 파일 등은 컴퓨터 장치(900)가 더 포함할 수 있는 저장 매체(상술한 영구 저장 장치)로 저장될 수 있다.

[0040] 입출력 인터페이스(940)는 입출력 장치(950)와의 인터페이스를 위한 수단일 수 있다. 예를 들어, 입력 장치는 마이크, 키보드 또는 마우스 등의 장치를, 그리고 출력 장치는 디스플레이, 스피커와 같은 장치를 포함할 수 있다. 다른 예로 입출력 인터페이스(940)는 터치스크린과 같이 입력과 출력을 위한 기능이 하나로 통합된 장치와의 인터페이스를 위한 수단일 수도 있다. 입출력 장치(950)는 컴퓨터 장치(900)와 하나의 장치로 구성될 수도 있다.

[0041] 또한, 다른 실시예들에서 컴퓨터 장치(900)는 도 9의 구성요소들보다 더 적은 혹은 더 많은 구성요소들을 포함할 수도 있다. 그러나, 대부분의 종래기술적 구성요소들을 명확하게 도시할 필요성은 없다. 예를 들어, 컴퓨터 장치(900)는 상술한 입출력 장치(950) 중 적어도 일부를 포함하도록 구현되거나 또는 트랜시버(transceiver), 데이터베이스 등과 같은 다른 구성요소들을 더 포함할 수도 있다.

[0042] 본 실시예에 따른 전해액촉매 발굴방법은 이러한 컴퓨터 장치(900)에 의해 수행될 수 있다. 이때, 컴퓨터 장치(900)의 프로세서(920)는 메모리(910)가 포함하는 운영체제의 코드나 적어도 하나의 컴퓨터 프로그램의 코드에 따른 제어 명령(instruction)을 실행하도록 구현될 수 있다. 여기서, 프로세서(920)는 컴퓨터 장치(900)에 저장된 코드가 제공하는 제어 명령에 따라 컴퓨터 장치(900)가 도 10의 방법이 포함하는 단계들(1010 내지 1030)을 수행하도록 컴퓨터 장치(900)를 제어할 수 있다.

[0043] 단계(1010)에서 컴퓨터 장치(900)는 제1원리계산을 통해 금속 유기체의 기존상태와 산화상태 각각의 최고피점궤도(HOMO) 및 최저공궤도(LUMO)의 수치를 예측할 수 있다. 여기서, 금속 유기체는 코발트(Co), 구리(Cu), 망간(Mn), 철(Fe), 니켈(Ni), 티타늄(Ti) 및 아연(Zn)로 구성된 군으로부터 선택되는 금속을 중심금속으로 포함하는 유기체를 포함할 수 있다. 다른 예로, 다른 예로, 금속 유기체는 금속을 중심금속으로 포함하는 프탈로사이아닌(phthalocyanine)을 포함할 수 있다. 이때, 컴퓨터 장치(900)는 앞서 도 1의 표(100)에 나타난 바와 같이, 제1원리계산을 이용하여 다양한 금속 유기체들 각각에 대해 기존상태와 산화상태 각각의 최고피점궤도(HOMO) 및 최저공궤도(LUMO)의 수치를 계산할 수 있다.

[0044] 단계(1020)에서 컴퓨터 장치(900)는 예측된 수치를 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압 및 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압과 비교할 수 있다. 예를 들어, 컴퓨터 장치(900)는 금속 유

기체의 기존상태에서의 최고피점궤도의 수치 및 금속 유기체의 산화상태에서의 최저공궤도의 수치를 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압의 범위를 비교하고, 금속 유기체의 산화상태에서의 최고피점궤도의 수치와 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압의 범위를 비교할 수 있다.

[0045] 단계(1030)에서 컴퓨터 장치(900)는 비교의 결과에 기반하여 전해질 용매를 위한 용해성촉매로서의 금속 유기체를 결정할 수 있다. 기존상태에서의 최고피점궤도의 수치 및 산화상태에서의 최저공궤도의 수치가 리튬페록사이드(Li2O2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압의 범위에 가까울수록 해당 금속 유기체가 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 분해에 유리할 수 있다. 또한, 산화상태의 금속 유기체가 전해질 용액을 분해하지 않기 위해서는 산화상태에서의 최고피점궤도의 수치가 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압의 범위보다 커야 한다. 따라서, 컴퓨터 장치(900)는 금속 유기체의 기존상태에서의 최고피점궤도의 수치 및 금속 유기체의 산화상태에서의 최저공궤도의 수치가 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압의 범위에 가까운 정도(제1 조건)에 기반하여 금속 유기체를 결정할 수 있다. 또한, 컴퓨터 장치(900)는 금속 유기체의 산화상태에서의 최고피점궤도의 수치가 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압의 범위보다 큰 정도(제2 조건)에 기반하여 금속 유기체를 결정할 수 있다. 제1 조건과 제2 조건을 모두 고려하여 금속 유기체를 결정하는 경우, 임의의 전해질 용액에 대해 해당 전해질 용액을 분해하지 않으면서도 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 분해에 적극적으로 참여할 수 있는 최적의 용해성촉매를 발견할 수 있게 해준다. 따라서, 해당 전해질 용액을 사용하는 리튬 전지를 위한 최적의 용해성촉매를 제시할 수 있게 된다.

[0046] 이상에서 설명된 시스템 또는 장치는 하드웨어 구성요소, 또는 하드웨어 구성요소 및 소프트웨어 구성요소의 조합으로 구현될 수 있다. 예를 들어, 실시예들에서 설명된 장치 및 구성요소는, 예를 들어, 프로세서, 콘트롤러, ALU(arithmetic logic unit), 디지털 신호 프로세서(digital signal processor), 마이크로컴퓨터, FPGA(field programmable gate array), PLU(programmable logic unit), 마이크로프로세서, 또는 명령(instruction)을 실행하고 응답할 수 있는 다른 어떠한 장치와 같이, 하나 이상의 범용 컴퓨터 또는 특수 목적 컴퓨터를 이용하여 구현될 수 있다. 처리 장치는 운영 체제(OS) 및 상기 운영 체제 상에서 수행되는 하나 이상의 소프트웨어 어플리케이션을 수행할 수 있다. 또한, 처리 장치는 소프트웨어의 실행에 응답하여, 데이터를 접근, 저장, 조작, 처리 및 생성할 수도 있다. 이해의 편의를 위하여, 처리 장치는 하나가 사용되는 것으로 설명된 경우도 있지만, 해당 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는, 처리 장치가 복수 개의 처리 요소(processing element) 및/또는 복수 유형의 처리 요소를 포함할 수 있음을 알 수 있다. 예를 들어, 처리 장치는 복수 개의 프로세서 또는 하나의 프로세서 및 하나의 콘트롤러를 포함할 수 있다. 또한, 병렬 프로세서(parallel processor)와 같은, 다른 처리 구성(processing configuration)도 가능하다.

[0047] 소프트웨어는 컴퓨터 프로그램(computer program), 코드(code), 명령(instruction), 또는 이들 중 하나 이상의 조합을 포함할 수 있으며, 원하는 대로 동작하도록 처리 장치를 구성하거나 독립적으로 또는 결합적으로(collectively) 처리 장치를 명령할 수 있다. 소프트웨어 및/또는 데이터는, 처리 장치에 의하여 해석되거나 처리 장치에 명령 또는 데이터를 제공하기 위하여, 어떤 유형의 기계, 구성요소(component), 물리적 장치, 가상 장치(virtual equipment), 컴퓨터 저장 매체 또는 장치에 구체화(embody)될 수 있다. 소프트웨어는 네트워크로 연결된 컴퓨터 시스템 상에 분산되어서, 분산된 방법으로 저장되거나 실행될 수도 있다. 소프트웨어 및 데이터는 하나 이상의 컴퓨터 판독 가능 기록매체에 저장될 수 있다.

[0048] 실시예에 따른 방법은 다양한 컴퓨터 수단을 통하여 수행될 수 있는 프로그램 명령 형태로 구현되어 컴퓨터 판독 가능 매체에 기록될 수 있다. 상기 컴퓨터 판독 가능 매체는 프로그램 명령, 데이터 파일, 데이터 구조 등을 단독으로 또는 조합하여 포함할 수 있다. 매체는 컴퓨터로 실행 가능한 프로그램을 계속 저장하거나, 실행 또는 다운로드를 위해 임시 저장하는 것일 수도 있다. 또한, 매체는 단일 또는 수개 하드웨어가 결합된 형태의 다양한 기록수단 또는 저장수단일 수 있는데, 어떤 컴퓨터 시스템에 직접 접속되는 매체에 한정되지 않고, 네트워크 상에 분산 존재하는 것일 수도 있다. 매체의 예시로는, 하드 디스크, 플로피 디스크 및 자기 테이프와 같은 자기 매체, CD-ROM 및 DVD와 같은 광기록 매체, 플롭티컬 디스크(floptical disk)와 같은 자기-광 매체(magneto-optical medium), 및 ROM, RAM, 플래시 메모리 등을 포함하여 프로그램 명령어가 저장되도록 구성된 것이 있을 수 있다. 또한, 다른 매체의 예시로, 애플리케이션을 유통하는 앱 스토어나 기타 다양한 소프트웨어를 공급 내지 유통하는 사이트, 서버 등에서 관리하는 기록매체 내지 저장매체도 들 수 있다. 프로그램 명령의 예에는 컴파일러에 의해 만들어지는 것과 같은 기계어 코드뿐만 아니라 인터프리터 등을 사용해서 컴퓨터에 의해서 실행될 수 있는 고급 언어 코드를 포함한다.

[0049] 이상의 설명은 본 발명의 기술 사상을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로서, 본 발명이 속하는 기술 분야에

서 통상의 지식을 가진 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 수정 및 변형이 가능할 것이다. 따라서 본 발명에 기재된 실시예는 본 발명의 기술 사상을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호 범위는 아래의 청구범위에 의해서 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술 사상은 본 발명의 권리범위에 포함되는 것으로 해석되어야 할 것이다.

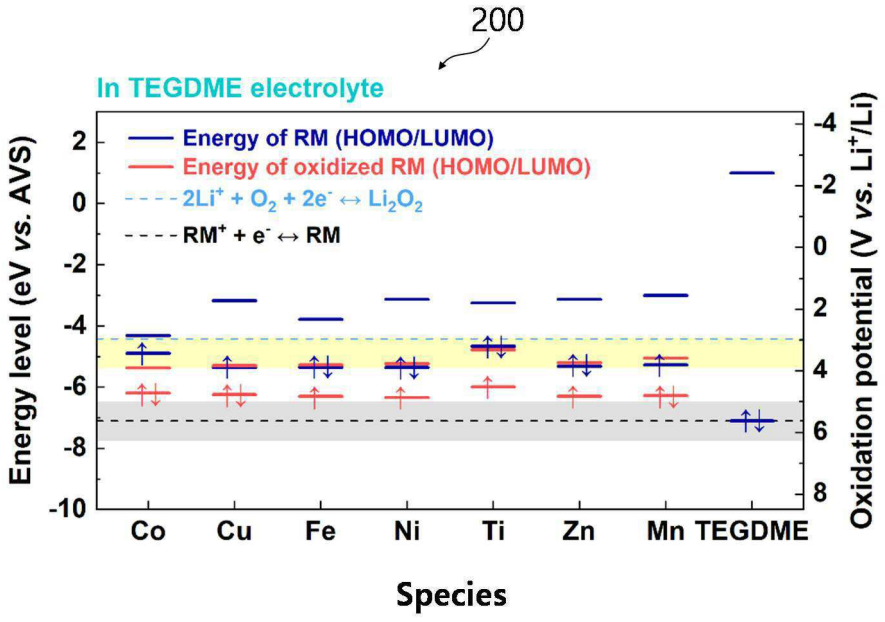
도면

도면1

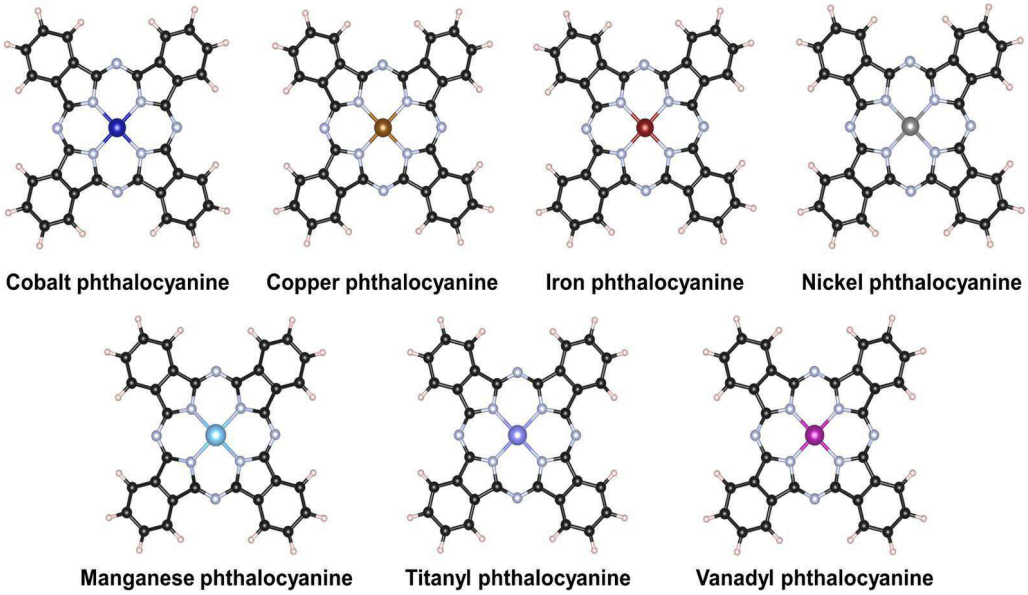
100

금속 유기체 (기본상태)		HOMO	LUMO	금속 유기체 (산화상태)		HOMO	LUMO
Co_Standard	a	-4.90097	-2.74885	Co_Oxi	a	-6.19676	-5.37417
	b	-6.36927	-4.31947		b	-6.19676	-5.37417
Cu_Standard	a	-5.3524	- 3.17988	Cu_Oxi	a	-6.25172	-5.29308
	b	-5.36655	-3.16083		b	-6.25172	-5.29308
Mn_Standard	a	-5.27322	-3.00926	Mn_Oxi	a	-6.28356	-5.05879
	b	-5.329	-2.95185		b	-6.28356	-5.05879
Fe_Standard	a	-5.35376	-3.78314	Fe_Oxi	a	-7.39921	-5.27566
	b	-5.35376	-3.78314		b	-6.30206	-4.25879
Ni_Standard	a	-5.35675	-3.13253	Ni_Oxi	a	-6.34751	-4.00491
	b	-5.35675	-3.13253		b	-7.55458	-5.23294
Ti_Standard	a	-4.66426	-3.24709	Ti_Oxi	a	-6.01798	-4.12274
	b	-4.66423	-3.24709		b	-5.94505	-4.08328
Zn_Standard	a	-5.31648	-3.13416	Zn_Oxi	a	-6.30506	-4.01063
	b	-5.31648	-3.13416		b	-7.7837	-5.19839

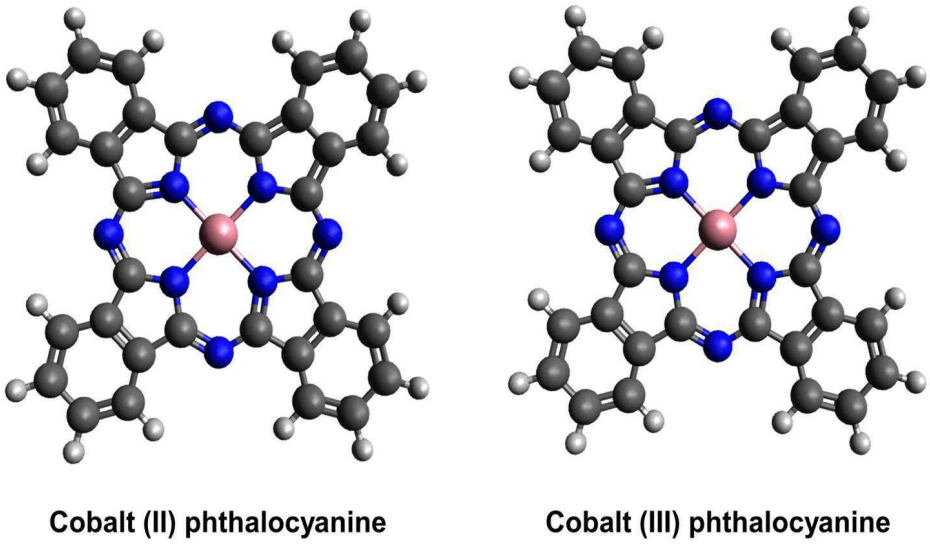
도면2



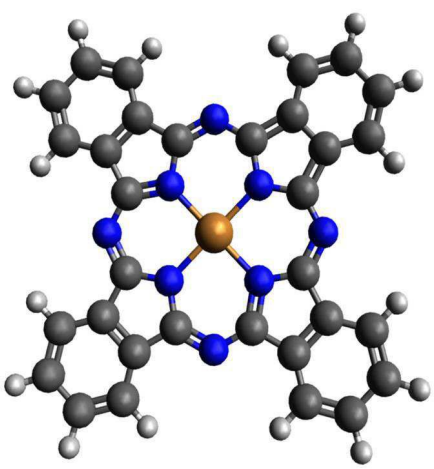
도면3


Cobalt phthalocyanine
Copper phthalocyanine
Iron phthalocyanine
Nickel phthalocyanine
Manganese phthalocyanine
Titanyl phthalocyanine
Vanadyl phthalocyanine

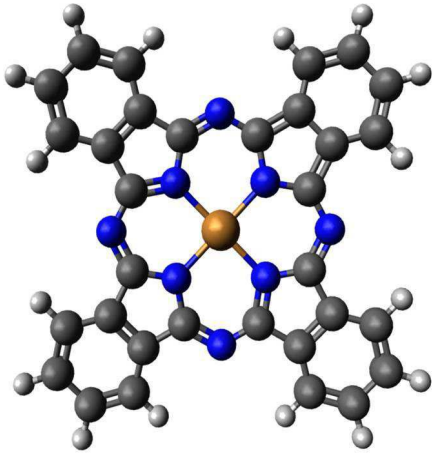
도면4


Cobalt (II) phthalocyanine
Cobalt (III) phthalocyanine

도면5

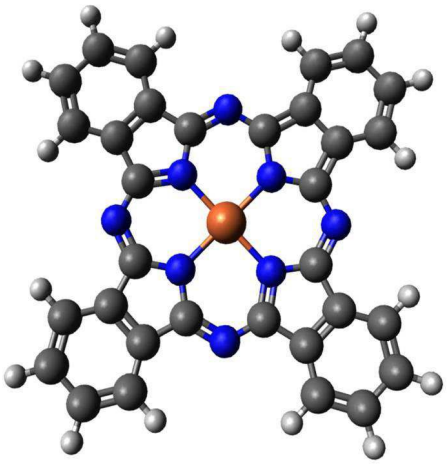


Copper (II) phthalocyanine

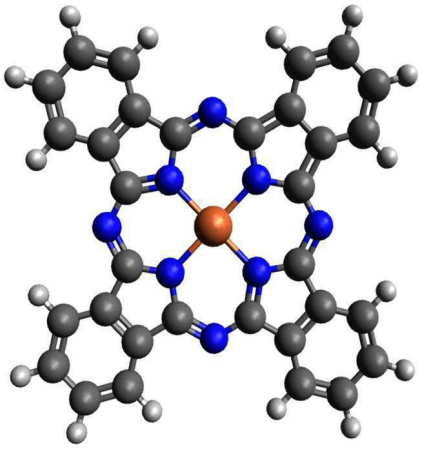


Copper (III) phthalocyanine

도면6



Iron (II) phthalocyanine



Iron (III) phthalocyanine

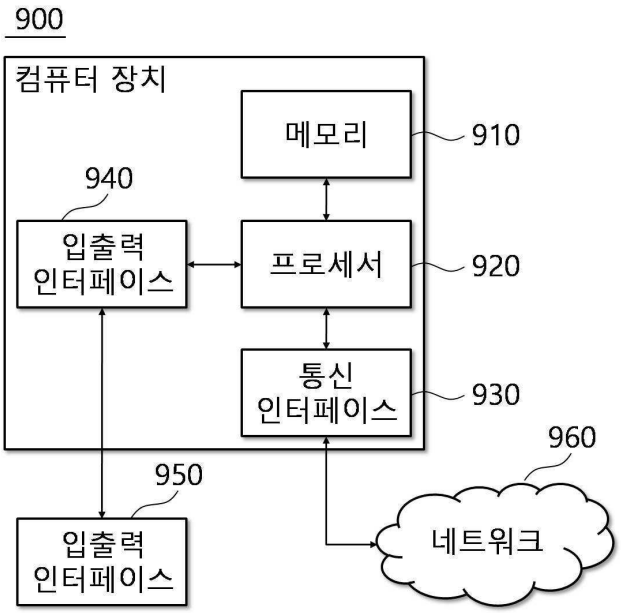
도면7

Atom	Charge Density (Iron (II) phthalocyanine)	Charge Density (Iron (III) phthalocyanine)	Atom	Charge Density (Iron (II) phthalocyanine)	Charge Density (Iron (III) phthalocyanine)
H	0.159455	0.174111	C	-0.12815	-0.11119
C	-0.13198	-0.11098	H	0.161832	0.174603
H	0.159914	0.174633	C	-0.15829	-0.12537
C	-0.15846	-0.12537	H	0.166098	0.178763
H	0.164749	0.178848	C	0.08645	0.084989
C	0.08784	0.085778	C	0.056063	0.053365
C	0.051248	0.051016	C	-0.15248	-0.11961
C	-0.15398	-0.11932	H	0.166228	0.178676
H	0.164593	0.178656	C	-0.13162	-0.11314
C	-0.13382	-0.11315	C	-0.05196	-0.01831
C	-0.06203	-0.01618	C	-0.01749	0.019816
C	-0.02864	0.019656	N	-0.24916	-0.233
N	-0.20155	-0.23324	N	-0.09273	-0.07725
N	-0.09455	-0.0779	H	0.159494	0.17415
H	0.161213	0.174111	C	-0.13224	-0.11123
C	-0.12782	-0.11085	H	0.15997	0.174697
H	0.161887	0.17467	C	-0.15829	-0.12514
C	-0.15853	-0.12558	H	0.164775	0.17887
H	0.1661	0.178774	C	0.087239	0.08514
C	0.087305	0.08585	C	0.051648	0.051442
C	0.056347	0.053708	C	-0.15398	-0.11935
C	-0.15267	-0.11978	H	0.164672	0.178737
H	0.166245	0.178705	C	-0.13387	-0.11317
C	-0.13171	-0.1132	C	-0.06266	-0.01678
C	-0.05211	-0.01846	C	-0.02848	0.01984
C	-0.01879	0.018472	N	-0.20159	-0.23319
N	-0.24843	-0.23222	N	-0.0943	-0.07772
N	-0.09254	-0.07705	Fe	0.722324	0.73358
H	0.161202	0.174081	-	-	-

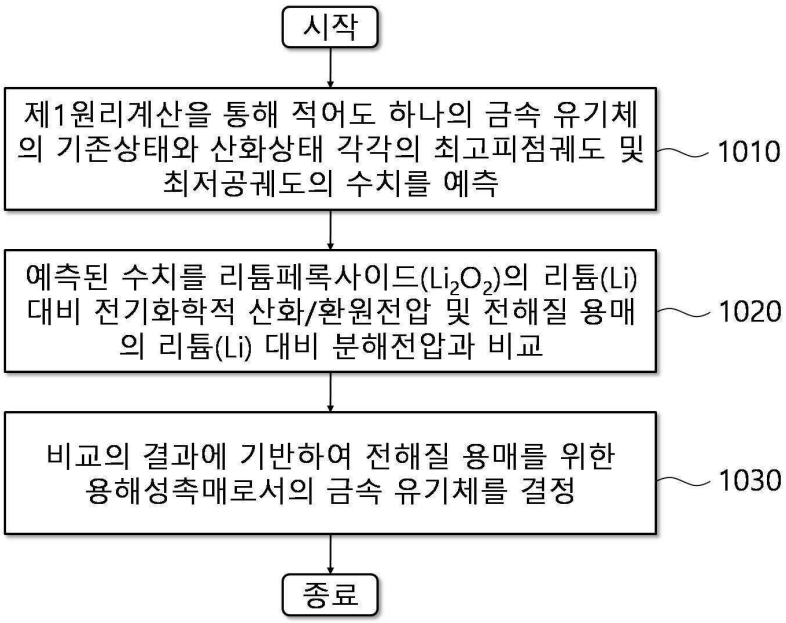
도면8

Atom	Charge Density (Zinc (II) phthalocyanine)	Charge Density (Zinc (III) phthalocyanine)	Atom	Charge Density (Zinc (II) phthalocyanine)	Charge Density (Zinc (III) phthalocyanine)
H	0.128104	0.172811	C	-0.09396	-0.11291
C	-0.09396	-0.1127	H	0.128075	0.173255
H	0.128075	0.173273	C	-0.15687	-0.1252
C	-0.15687	-0.12526	H	0.13134	0.177383
H	0.131341	0.177451	C	0.007492	0.079358
C	0.007486	0.080059	C	0.007594	0.046391
C	0.007584	0.044125	C	-0.15724	-0.11998
C	-0.15724	-0.11966	H	0.131232	0.177358
H	0.131232	0.177326	C	-0.09367	-0.115
C	-0.09366	-0.11504	C	-0.01366	-0.0397
C	-0.01364	-0.03748	C	-0.01388	0.002445
C	-0.01387	0.002297	N	-0.09282	-0.18023
N	-0.09278	-0.1803	N	-0.08251	-0.07767
N	-0.08251	-0.07833	H	0.128103	0.172851
H	0.128103	0.172815	C	-0.09396	-0.11295
C	-0.09395	-0.11257	H	0.128075	0.173336
H	0.128076	0.173319	C	-0.15687	-0.12505
C	-0.15688	-0.12546	H	0.131341	0.177475
H	0.131341	0.177395	C	0.007518	0.079505
C	0.007508	0.080298	C	0.007568	0.044487
C	0.007561	0.046695	C	-0.15723	-0.1197
C	-0.15723	-0.12011	H	-0.131231	0.177409
H	0.131232	0.177382	C	-0.09367	-0.11506
C	-0.09367	-0.11507	C	-0.01364	-0.03811
C	-0.01363	-0.03951	C	-0.0139	0.002136
C	-0.01389	0.000862	N	-0.09282	-0.18039
N	-0.09278	-0.17964	N	-0.08251	-0.07814
N	-0.08251	-0.07743	Zn	0.682944	0.766371
H	0.128103	0.172788	-	-	-

도면9


900
컴퓨터 장치
메모리
910
940
입출력
인터페이스
프로세서
920
통신
인터페이스
930
960
950
입출력
인터페이스
네트워크

도면10


시작
제1원리계산을 통해 적어도 하나의 금속 유기체의 기존상태와 산화상태 각각의 최고피점궤도 및 최저공궤도의 수치를 예측
1010
예측된 수치를 리튬페록사이드(Li_2O_2)의 리튬(Li) 대비 전기화학적 산화/환원전압 및 전해질 용매의 리튬(Li) 대비 분해전압과 비교
1020
비교의 결과에 기반하여 전해질 용매를 위한 용해성촉매로서의 금속 유기체를 결정
1030
종료