

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2017년 3월 2일 (02.03.2017)



(10) 국제공개번호
WO 2017/034280 A1

- (51) 국제특허분류:
G06F 19/00 (2011.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2016/009273
- (22) 국제출원일: 2016년 8월 23일 (23.08.2016)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2015-0120964 2015년 8월 27일 (27.08.2015) KR
- (71) 출원인: 고려대학교산학협력단 (KOREA UNIVERSITY RESEARCH AND BUSINESS FOUNDATION) [KR/KR]; 02841 서울시 성북구 안암로 145 고려대학교, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 강정원 (KANG, Jeong Won); 05834 서울시 송파구 중대로 24, 210-303, Seoul (KR). 강성신 (KANG, Sung Shin); 62255 광주광역시 광산구 첨단중앙로 181 번길 88-16, 502-406, Gwangju (KR).
- (74) 대리인: 이처영 (LEE, Cheo Young) 등; 06133 서울시 강남구 테헤란로 123 11층, Seoul (KR).

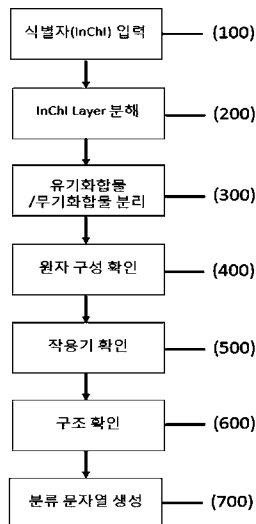
- (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, 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).

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

(54) Title: METHOD OF CLASSIFYING COMPOUNDS BY USING MOLECULAR STRUCTURE OF COMPOUNDS

(54) 발명의 명칭: 화합물의 분자구조를 이용한 화합물의 분류 방법



100 ... Input identifier (InChI)
200 ... Disassemble InChI Layer
300 ... Separate organic compounds / inorganic compounds
400 ... Confirm atomic structure
500 ... Confirm functional groups
600 ... Confirm structure
700 ... Generate classifying character string

(57) Abstract: A method of classifying compounds according to the present invention comprises the steps of: (a) inputting an InChI (International Chemical Identifier) of a compound; (b) using the identifier to sort layers and confirming whether the compound is an organic compound or an inorganic compound; (c) not classifying the compound when the compound is an inorganic compound, and confirming the structural atomic components and determining an atomic class when the compound is an organic compound; (d) confirming functional groups and determining a main class; (e) confirming the structure and determining a sub class; and (f) and generating a classifying character string including the atomic class, the main class, and the sub class, wherein by using the InChIs from among compound identifiers for organic compounds and confirming the functional groups the structures, organic compounds are accurately classified in a short amount of time in a database, and predicting the physical properties of compounds is easy.

(57) 요약서: 본 발명에 의한 화합물의 분류방법은 (a) 화합물의 InChI(International Chemical Identifier) 식별자를 입력하는 단계, (b) 상기 식별자를 이용하여 레이어(layer)를 분류하여 유기화합물 또는 무기화합물인지 확인하는 단계, (c) 무기화합물인 경우에는 분류를 수행하지 않고, 유기화합물인 경우에는 구성 원자 성분을 확인하여 원자 클래스(atomic class)를 결정하는 단계, (d) 작용기를 확인하여 메인 클래스(main class)를 결정하는 단계, (e) 구조를 확인하여 서브 클래스(sub class)를 결정하는 단계 및 (f) 원자 클래스, 메인 클래스 및 서브 클래스를 포함하는 분류 문자열을 생성하는 단계를 포함하며, 유기화합물에 대해서 화합물 식별자중 InChI를 이용하여 작용기와 구조를 확인함으로써 유기화합물을 데이터베이스 내에서 짧은 시간 내에 정확하게 분류하며, 화합물의 물성 예측이 용이하다.

WO 2017/034280 A1

명세서

발명의 명칭: 화합물의 분자구조를 이용한 화합물의 분류 방법 기술분야

- [1] 본 발명은 화합물의 분자구조를 이용한 화합물의 분류 방법에 관한 것으로, 더욱 상세하게는 화합물의 InChI(International Chemical Identifier) 식별자를 이용하여 원자 구성, 작용기 및 구조를 확인하여 화합물을 분류하는 방법에 관한 것이다.

[2]

배경기술

- [3] 과학 기술이 발전함에 따라서 수많은 물질들이 사용되었고, 이를 이용한 실험을 통하여 물리적, 화학적 물성은 데이터베이스에 입력되었다. 이로써 데이터베이스에는 수많은 화합물의 실험데이터가 축적되어있고 데이터베이스 사용자는 대상으로 하는 화합물의 검색을 통해 화합물사용 전에 물성을 확인할 수 있게 되었다.
- [4] 이러한 이유로써 데이터베이스에 포함된 화합물을 분석하고 정리하여 저장하는 것은 사용자의 편의성뿐만 아니라 데이터가 활용될 수 있는 방법을 넓혀준다. 따라서 화합물을 포함하는 데이터베이스의 경우에 비슷한 화합물의 구분을 위하여 화합물의 이름이외에 화합물의 구조를 포함하는 식별자 또는 3차원 구조를 데이터베이스에 포함하여 화합물간의 구분이 쉽게 한다.
- [5] 데이터베이스에 포함된 화합물을 구분하는 방법으로 가장 좋은 방법은 화합물의 3차원적 구조를 1차원 문자배열로 변환한 후 이를 비교하는 것이다. 이러한 변환방법으로 가장 많이 쓰이는 방법은 SMILES(Simplified molecular-input line-entry system) 과 InChI(International Chemical Identifier) 이다. 이 두 변환방법으로 생성된 문자배열은 3차원 구조로 저장하는 방법보다 DB의 크기를 줄일 수 있는 장점을 가지고 있다.
- [6] SMILES는 분자 내에 포함된 원자를 선형으로 표시하여 원자의 배열과 결합을 나타낸다. 따라서 SMILES로 나타낸 3차원 구조는 일반적으로 가독성이 좋고, 단순한 3차원 구조를 나타내는데 장점을 가지고 있다. 그러나 SMILES는 원자의 방향 및 순서를 고려하지 않기 때문에 같은 구조에 대해서 여러 방법으로 표현되어 복잡한 구조의 경우 구분하기 어려운 단점을 가지고 있다.
- [7] InChI는 IUPAC과 NIST에서 개발된 1차원 배열로써 분자 내에 포함된 원자의 구성, 배열, 결합 등 여러 정보에 대해서 각각의 레이어(layer)에 나타낸다. 이는 SMILES에 비해 가독성이 떨어지지만 복잡한 구조 또는 같은 구조를 가진 경우에 대해서 구분이 가능하며, SMILES에 포함되지 않는 수소의 결합 또는 공명구조에 대해서 정확히 표현이 가능하다.
- [8] 실제 연구에서는 단일물성에 대해서 검색하는 경우 이외에도 특정성질을 가진

화합물의 물성이 필요한 경우가 많이 존재한다. 특히 유기화합물의 경우 작용기 또는 구조에 따라 화합물의 물성 및 반응성이 크게 영향을 받는다. 따라서 유기화합물의 경우에는 작용기 또는 구조에 따라서 데이터 분류를 수행하는 것이 필요하다. 이러한 경우 일반적인 데이터 분류방법은 화합물의 작용기의 이름 또는 식별자 내의 구조를 통해 분류하게 된다. 하지만 이 방법 모두 이름과 식별자에 포함된 구조를 분석하여 가능한 모든 경우의 수에 대해서 찾기 위해선 많은 시간이 필요하며, 데이터베이스 활용에 효율성이 떨어지는 단점이 존재한다.

- [9] 종래의 기술은 화합물을 분류하기 위해서 데이터베이스 내에 포함된 이름, 구조식, 식별자를 통하여 분류를 수행하였다. 하지만 이 방법에서는 한가지 구조를 분류하기 위하여 이름과 식별자 내에 포함된 모든 경우의 수에 대해서 직접 검색을 하는 방법을 사용하였고 이 방법은 시간이 많이 소요될 뿐만 아니라 경우의 수에 대해서 누락을 한다면 제대로 분류가 수행되지 않는 문제점을 가지고 있다.

[10]

- [11] 이에 본 발명자들은 상기 문제점을 해결하기 위하여 예의 노력한 결과, 유기화합물에 대한 화합물 식별자 중 InChI를 이용하여 작용기와 구조를 확인하고, 이를 프로그램으로 개발하여 유기화합물을 데이터베이스 내에서 짧은 시간 내에 효과적으로 분류할 수 있다는 것을 확인하고, 본 발명을 완성하게 되었다.

[12]

- [13] **발명의 요약**

- [14] 본 발명의 목적은 검색 속도가 빠르며, 정확성이 탁월하며 화합물의 물성 예측이 용이한 화합물의 분류방법을 제공하는데 있다.

[15]

- [16] 상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은 (a) 화합물의 InChI(International Chemical Identifier) 식별자를 입력하는 단계; (b) 상기 식별자를 이용하여 레이어(layer)를 분류하여 유기화합물 또는 무기화합물인지 확인하는 단계; (c) 무기화합물인 경우에는 분류를 수행하지 않고, 유기화합물인 경우에는 구성 원자 성분을 확인하여 원자 클래스(atomic class)를 결정하는 단계; (d) 작용기를 확인하여 메인 클래스(main class)를 결정하는 단계; (e) 구조를 확인하여 서브 클래스(sub class)를 결정하는 단계; 및 (f) 원자 클래스, 메인 클래스 및 서브 클래스를 포함하는 분류 문자열을 생성하는 단계;를 포함하는 화합물의 분류방법을 제공한다.

[17]

도면의 간단한 설명

- [18] 도 1은 본 발명에 따라 InChI 식별자를 이용하여 화합물을 분류하는 단계를

개략적으로 도시한 도면이다.

[19] 도 2는 본 발명에 따라 원자 클래스(atomic class)를 결정하는 단계를 도시한 플로우차트이다.

[20]

[21] 발명의 상세한 설명 및 구체적인 구현에

[22] 다른 식으로 정의되지 않는 한, 본 명세서에서 사용된 모든 기술적 및 과학적 용어들은 본 발명이 속하는 기술 분야에서 숙련된 전문가에 의해서 통상적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 갖는다. 일반적으로, 본 명세서에서 사용된 명명법은 본 기술 분야에서 잘 알려져 있고 통상적으로 사용되는 것이다.

[23]

[24] 본 발명에서는 유기 화합물에 대해서 IUPAC의 화합물 식별자 InChI가 포함된 데이터베이스에 존재하는 물질의 작용기 또는 구조에 대한 검색을 통해 물질이 작용기와 구조를 나타내는 것을 목적으로 하며 프로그램을 통하여 많은 시간을 소모하지 않고 물질 분류를 수행하는 것을 확인하였다.

[25]

[26] 따라서, 본 발명은 일 관점에서, (a) 화합물의 InChI(International Chemical Identifier) 식별자를 입력하는 단계; (b) 상기 식별자를 이용하여 레이어(layer)를 분류하여 유기화합물 또는 무기화합물인지 확인하는 단계; (c) 무기화합물인 경우에는 분류를 수행하지 않고, 유기화합물인 경우에는 구성 원자 성분을 확인하여 원자 클래스(atomic class)를 결정하는 단계; (d) 작용기를 확인하여 메인 클래스(main class)를 결정하는 단계; (e) 구조를 확인하여 서브 클래스(sub class)를 결정하는 단계; 및 (f) 원자 클래스, 메인 클래스 및 서브 클래스를 포함하는 분류 문자열을 생성하는 단계;를 포함하는 화합물의 분류방법에 관한 것이다.

[27] 본 발명은 종래의 분류방법과 달리 화합물에 대해서 고유하게 부여되는 식별자인 InChI를 이용하여 화합물의 작용기와 구조를 통해 데이터를 분류하는 방법이다.

[28] 본 발명에서는 화합물의 InChI 식별자를 이용하여 원자 클래스(atomic class), 메인 클래스(main class), 서브 클래스(sub class)로 분류를 수행한다. 원자 클래스(atomic class)는 원자 구성에 관한 분류이며, 메인 클래스(main class)는 작용기에 대한 구분, 서브 클래스(sub class)는 구조에 관한 분류이다.

[29] 도 1은 InChI 식별자를 이용하여 화합물을 분류하는 단계에 대해서 나타내고 있다. 도 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 의한 화합물을 분류하는 방법은 InChI 입력(100), InChI 레이어(layer) 분해(200), 무기화합물/유기화합물 분리(300), 원자구성확인(400), 작용기 확인(500), 구조확인(600) 및 분류 문자열 생성(700)으로 총 7단계로 구성되어 있다.

[30] 본 발명에서 사용하는 화합물 식별자는 InChI로서 텍스트 또는 데이터베이스로부터 InChI 입력(100)을 통해 화합물의 식별자를 문자열로서

입력할 수 있다.

- [31] 입력된 InChI는 InChI 레이어(layer) 분해(200)에 의해 각각의 레이어로 분해되며 이 구분 기준 및 설명은 표 1에 나타낸다. 각각의 레이어 중 화합물의 분류에 사용되는 것은 메인 레이어(main layer)와 전하 레이어(charge layer)이며 그 이외의 레이어를 통한 분류는 광학 및 구조 이성질체, 동위원소에 대한 분류이므로 작용기와 모양은 구분하지 않는다.

[32]

[33] [표1]

구분	접두사	이름	설명
Main layer	없음	화학식	화합물의 화학식
	/c	원자연결	수소를 제외한 원자의 연결성
	/h	수소	각 원자에 연결된 수소의 개수
Charge layer	/q	전하	순 전하량
	/p	양전하	순 양전하량
Stereo layer	/b	시스-트랜스 결합	시스-트랜스 이성질체에 대한 구분
	/t, /m	패러티	사면체 탄소(tetrahedral carbon)의 이성질체 구분
	/s	구조이성질체	입체 이성질체에 대한 구분
Extra layer	/i	동위원소	동위원소 표시

[34]

- [35] 메인 레이어(main layer, 200)를 통한 분류는 표 1에 나타낸 바와 같이 접두사에 따라서 구분되며 본 발명에서는 화학식 레이어, 원자연결 레이어, 수소 레이어가 접두사를 제거한 후 화학식 레이어, 원자연결 레이어 또는 수소 레이어로 분류할 수 있다. 또한, 전하 레이어(charge layer)는 접두사에 따라서 구분되며, 접두사를 제거한 후 전하 레이어 또는 양전하로 분류할 수 있다.

- [36] 무기화합물과 유기화합물의 구분(300)은 화학식 레이어의 확인을 통해서 구분된다. 화학식 레이어에 탄소가 존재하지 않거나, 수소 레이어가 존재하지 않는 경우 무기화합물로 분류한다. 또한 유기화합물 중에서 금속과 결합된 경우는 유기염으로 분류한다. 이 단계에서 유기화합물로 분류된 화합물은 원자 클래스(atomic class)를 분류로 갖게 되고 구조 특이성 및 작용기가 존재하지 않는 경우기 대다수이므로 더 이상 분류를 수행하지 않는다.

- [37] 위의 무기화합물과 유기화합물의 구분(300)을 통해 유기화합물로 구분된 화합물은 포함된 원자에 따라서 원자 클래스(atomic class)가 결정된다. 원자 클래스(atomic class)는 탄소와 수소 이외의 원자의 포함여부에 따라서 결정되게

되고 이는 화학식 레이어를 아래 도 2의 방법을 통해 분석하여 원자 클래스를 결정할 수 있다. 원자 클래스(atomic class)를 결정하는 단계는 (a1) 화학식 레이어($i=0$)를 로드하는 단계; (a2) 화학식 레이어의 문자 원자 레이어($i+1$)가 소문자($i=i+2$)인 경우에는 구성원자를 확인하고, 소문자가 아닌 경우에는 $i=i+1$ 처리한 후에 구성원자를 확인하는 단계; (a3) 문자 원자 레이어(i)가 숫자인 경우에는 $i=i+1$ 처리한 후에 (a3)의 처음으로 가고, 숫자가 아닌 경우에는 원자의 개수를 확인하는 단계; 및 (a4) 문자열 종결인 경우에는 전체 단계를 종결하고, 종결이 아닌 경우에는 (a2) 단계로 가서 반복하는 단계를 포함할 수 있다.

[38] 각각의 원자 클래스는 표 2에 나타나 있으나 표 2에 나타난 원자로만 한정되는 것은 아니다.

[39] 도 2에서 원자의 구성은 화합물 레이어의 문자를 읽음으로써 확인한다. (410)에서 화합물 레이어를 가져오고 문자열 첫 글자부터 읽어온다. 원소의 식별은 원소기호를 확인함으로써 확인한다(420). 원소의 첫 글자는 모두 대문자이기 때문에 두 번째 글자를 확인한 후 소문자인 경우에는 두 글자의 원소기호이며, 대문자 또는 숫자인 경우에는 한글자의 원소기호이다. 얻어진 원소기호를 통해 구성원자가 확인된다(430). 원소기호 바로 뒤의 문자를 확인하여 (440) 숫자인 경우에는 원자의 개수를, 영자 또는 문자열 끝인 경우에는 해당원자가 1개로 원자의 개수를 확인할 수 있다(450). 위의 방법을 문자열이 종결될 때까지 반복하면(460) 화합물 내에 포함된 모든 원자의 구성을 확인할 수 있다.

[40] 원자 구성 확인(400)을 통해서 원자 클래스(atomic class)를 구분하게 되며, 작용기 확인(500)을 통하여 메인 클래스(main class)가 결정된다. 대부분의 유기 화합물은 작용기에 따라서 물리화학적 성질이 변화하며, 화합물 내 구성 원소에 따라 그 작용기가 변화하게 된다. 메인 클래스(main class)의 분류는 원자 클래스(atom class)에 따라 변화하지만 같은 족의 원소는 결합경향이 비슷하기 때문에 원자연결 레이어와 수소 레이어를 사용하면 작용기에 따라 분류가 가능하다. 14족, 15족, 16족 및 17족의 원소인 경우, 알칸(alkane), 알켄(alkene), 알킨(alkyne), 나프텐(naphthene), 아로마틱(aromatic), 아민, 아마이드, 니트로, 니트릴, 알코올, 케톤, 에테르, 아세탈, 퍼옥사이드, 에폭사이드, 알데히드, 카복실산, 에스테르, 안하이드라이드, 클로라이드, 플루오라이드, 브로마이드, 아이오다이드, 설파이드(sulfide), 티올, 설파이트(sulfite), 설폰(sulfone), 설폰산(sulfonic acid), 설페이트(sulfate), 포스핀(phosphine), 실란(silane) 또는 실록산(siloxane)의 작용기로 분류될 수 있다.

[41] 표 2에는 15족, 16족, 17족에 대해서 각각 질소, 산소, 염소에 대해 분류하는 기준이 나타내었고 이는 같은 족에 대해서 같은 방법으로 분류가 가능하다.

[42]

[43] [표2]

족	class	formula	# of Guest atom	# of hydrogen	상대적 위치			
					-1	+1	+2	+3
14	Alkane	C-C	0	2	C	C		
14	Alkene	C=C	0	1	C	C		
14	Alkyne	C≡C	0	0	C	C		
14	Naphthene	C-C(ring)	0	2	C	C		
14	Aromatic	C-C(benzene ring)	0	1	C	C		
15	Amine	C-N-H	1	1	C			
15	Nitrile	C≡N	1	0	C	C		
16	Alcohol	C-O-H	1	1	C			
16	Ether	C-O-C	1	0	C	C		
16	Acetal	C-O-C-O-C	2	0	C	C	O	C
16	Peroxide	C-O-O-C	2	0	C	O	C	
16	Epoxide	C-O-C(ring)	1	0	C	C		
16	Ketone	C=O	1	0	C	C		
16	Aldehyde	HC=O	1	1	C			
16	Carboxylic acid	C(=O)-O-H	2	0.5	C	O		
16	Ester	C(=O)-O-C	2	0	C	O	C	
16	Anhydride	C(=O)-O-C(=O)	3	0	C	O	C	O
17	Chloride	C-Cl	1	0	C			

[44]

[45] 메인 클래스(main class)결정단계에서 가장 중요한 것은 수소와 탄소 이외에 포함된 객체원자의 연결 위치이며 이는 화학식 레이어에서 수소를 제외한 원자의 개수를 셈으로써 확인할 수 있다. 또한 수소의 개수는 수소 레이어를 통하여 해당 원자에 결합된 수소가 몇 개인지 확인함으로써 계산하는 것이 가능하다.

[46]

[47] 작용기 확인(500) 단계를 통해 얻어진 메인 클래스(main class)는 작용기에 대한 구분만을 나타내고 구조에 대한 구분을 하지 않는다. 따라서 화합물의 구조는 구조 확인 단계(600)을 통해서 이루어진다. 화합물의 구조 분류는 표 3과같이 분류하며 이는 원자연결 레이어에서 가지 또는 수소연결 레이어를 통해 불포화 결합을 확인함으로써 구할 수 있다. 이외에도 메인 클래스에서 작용기가 두 개 이상 발견되었거나 고리 구조, 방향구조 역시 이 과정을 통해서 구분이 가능하며, 이 단계를 통하여 구분되면 메인 클래스 앞에 접두사로서 구분문자를 붙임으로써 서브 클래스로 분류가 가능하다.

[48]

즉, 상기 구조는 상기 원자연결 레이어에서 가지 또는 수소연결 레이어를 통해 노르말(N-), 브랜치(Branched-), 불포화(Unsaturated-), 폴리(Poly-), 사이클릭(Cyclic-) 또는 방향족(Aromatic-)으로 메인 클래스의 접두사로 분류되거나 서브 클래스로 분류될 수 있다.

[49]

[50] [표3]

접두사	설명
N-	특별한 구조가 존재하지 않을 때
Branched	가지구조가 존재할 때
Unsaturated	불포화 결합이 존재할 때
Poly	같은 작용기가 여러 개 있을 때
Cyclic	고리 모양의 구조를 가질 때
Aromatic	방향족의 구조를 가질 때

[51]

[52] 상기 원자 구성 확인(400), 작용기 확인(500), 구조 확인(600) 단계를 통하여 각각 얻어진 원자 클래스(atomic class), 메인 클래스(main class), 서브 클래스(sub class)는 분류결과로써 나타나며 이 방법을 컴퓨터 프로그래밍으로 코드로 구현하는 것이 가능하며, 화합물의 InChI를 포함하는 모든 데이터 베이스에 대해서 코드로 구현 데이터로써 기록하는 것이 가능하다.

[53]

[54] 이하, 실시예를 통하여 본 발명을 더욱 상세히 설명하고자 한다. 이들 실시예는 오로지 본 발명을 예시하기 위한 것으로, 본 발명의 범위가 이들 실시예에 의해 제한되지 않는 것은 당업계에서 통상의 지식을 가진 자에게 있어서 자명할 것이다.

[55]

[56] 실시예

[57] 실시예 1

[58] 본 발명의 설명을 돕기 위하여 상기 기술한 방법의 단계에 따라서 예시 물질들을 분류하였다. 실시예 1에서는 시행한 물질 및 각각의 단계에서 분류 결과를 표 4에 나타내었다.

[59]

[60] [4]

Classification			
Atomic class	Main class	Main class	Description
Hydrocarbons	Alkanes	n- Alkanes	Hydrocarbon only composed of -CH ₂ - chain and ending CH ₃ groups only
Hydrocarbons	Alkanes	Branched Alkanes	Saturated hydrocarbon with branches
Hydrocarbons	Alkenes	n- Alkenes	Unsaturated hydrocarbon with single double bond and no branches
Hydrocarbons	Alkenes	Branched Alkenes	Unsaturated hydrocarbon with single double bond and branches
Hydrocarbons	Alkenes	n- Dialkenes	Unsaturated hydrocarbons with two double bonds and no branch
Hydrocarbons	Alkenes	Branched Dialkenes	Unsaturated hydrocarbons with two double bonds and branches
Hydrocarbons	Alkenes	Poly Alkenes	Unsaturated hydrocarbons with more than two double bonds and branches
Hydrocarbons	Alkynes	n- Alkynes	Unsaturated hydrocarbon with single triple bond and no branch
Hydrocarbons	Alkynes	Branched Alkynes	Unsaturated hydrocarbon with single triple bond and branches
Hydrocarbons	Alkynes	Poly Alkynes	Unsaturated hydrocarbons with more than one triple bonds and branches
Hydrocarbons	Alkynes	Unclassified Alkynes	Unsaturated hydrocarbons with double bonds and triple bonds
Hydrocarbons	Naphthenes	n- Cycloalkanes	Cyclic alkane without branches
Hydrocarbons	Naphthenes	Alkyl Cycloalkanes	Cyclic alkane with branches
Hydrocarbons	Naphthenes	Poly Cycloalkanes	Cyclic alkane with multiple rings
Hydrocarbons	Naphthenes	Unsaturated Cycloalkanes	Cyclic alkane with unsaturated bonds (double, triple)
Hydrocarbons	Aromatics	Alkyl Aromatics	Aromatics with benzene ring and saturated branches
Hydrocarbons	Aromatics	Unsaturated Aromatics	Aromatics with benzene ring and unsaturated branches (double, triple bonds)
Hydrocarbons	Aromatics	Cyclic Alkyl Aromatics	Aromatics with benzene ring and cyclic branches
Hydrocarbons	Aromatics	Poly Aromatics	Aromatics with multiple

[61]

			condensed rings with/without alkyl chains [↗]
Hydrocarbons[↗]	Polyfunctional[↗]	Unclassified Hydrocarbons[↗]	Hydrocarbons composed of C,H and cannot be classified by above list[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Alcohols[↗]	n- Aliphatic Alcohols[↗]	Alcohols with a straight hydrocarbon chain[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Alcohols[↗]	Branched Aliphatic Alcohols[↗]	Alcohols with branched hydrocarbon chains[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Alcohols[↗]	Unsaturated Aliphatic Alcohols[↗]	Alcohols with unsaturated hydrocarbon chains[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Alcohols[↗]	Cyclic Aliphatic Alcohols[↗]	Alcohols with cyclic hydrocarbon chains[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Alcohols[↗]	Aromatic Alcohols[↗]	Alcohols with aromatic rings[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Alcohols[↗]	Alkyl Poly Alcohols[↗]	Alcohols with multiple -OH groups and alkyl chains[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Alcohols[↗]	Aromatic Poly Alcohols[↗]	Alcohols with multiple -OH groups and aromatic rings[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ketones[↗]	n- Aliphatic Ketones[↗]	Ketones with a straight hydrocarbon chain[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ketones[↗]	Branched Aliphatic Ketones[↗]	Ketones with branched hydrocarbon chains[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ketones[↗]	Unsaturated Aliphatic Ketones[↗]	Ketones with unsaturated hydrocarbon chains[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ketones[↗]	Cyclic Aliphatic Ketones[↗]	Ketones with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ketones[↗]	Aromatic Ketones[↗]	Ketones with aromatic rings[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ketones[↗]	Alkyl Poly Ketones[↗]	Ketones with multiple -CO- groups and alkyl chains[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ketones[↗]	Aromatic Poly Ketones[↗]	Ketones with multiple -CO- groups and aromatic rings[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ethers[↗]	n- Aliphatic Ethers[↗]	Ethers with a straight hydrocarbon chain[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ethers[↗]	Branched Aliphatic Ethers[↗]	Ethers with branched hydrocarbon chains[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ethers[↗]	Unsaturated Aliphatic Ethers[↗]	Ethers with unsaturated hydrocarbon chains[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ethers[↗]	Cyclic Aliphatic Ethers[↗]	Ethers with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ethers[↗]	Aromatic Ethers[↗]	Ethers with aromatic rings[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ethers[↗]	Alkyl Poly Ethers[↗]	Ethers with multiple -O- groups and alkyl chains[↗]
Oxygenated Derivatives[↗]	Ethers[↗]	Aromatic Poly Ethers[↗]	Ethers with multiple -O- groups and aromatic rings[↗]
Oxygenated	Esters[↗]	n- Aliphatic Esters[↗]	Esters with a straight

[62]

Derivatives^o			hydrocarbon chain ^o
Oxygenated Derivatives^o	Esters^o	Branched Aliphatic Esters^o	Esters with branched hydrocarbon chains^o
Oxygenated Derivatives^o	Esters^o	Unsaturated Aliphatic Esters^o	Esters with unsaturated hydrocarbon chains^o
Oxygenated Derivatives^o	Esters^o	Cyclic Aliphatic Esters^o	Esters with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)^o
Oxygenated Derivatives^o	Esters^o	Aromatic Esters^o	Esters with aromatic rings^o
Oxygenated Derivatives^o	Esters^o	Alkyl Poly Esters^o	Esters with multiple -COO- groups and alkyl chains^o
Oxygenated Derivatives^o	Esters^o	Aromatic Poly Esters^o	Esters with multiple -COO- groups and aromatic rings^o
Oxygenated Derivatives^o	Aldehydes^o	n- Aliphatic Aldehydes^o	Aldehydes with a straight hydrocarbon chain^o
Oxygenated Derivatives^o	Aldehydes^o	Branched Aliphatic Aldehydes^o	Aldehydes with branched hydrocarbon chains^o
Oxygenated Derivatives^o	Aldehydes^o	Unsaturated Aliphatic Aldehydes^o	Aldehydes with unsaturated hydrocarbon chains^o
Oxygenated Derivatives^o	Aldehydes^o	Cyclic Aliphatic Aldehydes^o	Aldehydes with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)^o
Oxygenated Derivatives^o	Aldehydes^o	Aromatic Aldehydes^o	Aldehydes with aromatic rings^o
Oxygenated Derivatives^o	Aldehydes^o	Alkyl Poly Aldehydes^o	Aldehydes with multiple -COH groups and alkyl chains^o
Oxygenated Derivatives^o	Aldehydes^o	Aromatic Poly Aldehydes^o	Aldehydes with multiple -COH groups and aromatic rings^o
Oxygenated Derivatives^o	Acids^o	n- Aliphatic Carboxylic acids^o	Acids with a straight hydrocarbon chain^o
Oxygenated Derivatives^o	Acids^o	Branched Aliphatic Carboxylic acids^o	Acids with branched hydrocarbon chains^o
Oxygenated Derivatives^o	Acids^o	Unsaturated Aliphatic Carboxylic acids^o	Acids with unsaturated hydrocarbon chains^o
Oxygenated Derivatives^o	Acids^o	Cyclic Aliphatic Carboxylic acids^o	Acids with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)^o
Oxygenated Derivatives^o	Acids^o	Aromatic Carboxylic acids^o	Acids with aromatic rings^o
Oxygenated Derivatives^o	Acids^o	Alkyl Poly Carboxylic acids^o	Acids with multiple -COOH groups and alkyl chains^o
Oxygenated Derivatives^o	Acids^o	Aromatic Poly Carboxylic acids^o	Acids with multiple -COOH groups and aromatic rings^o
Oxygenated Derivatives^o	Anhydrides^o	n- Aliphatic Anhydrides^o	Anhydrides with a straight hydrocarbon chain^o
Oxygenated Derivatives^o	Anhydrides^o	Branched Aliphatic Anhydrides^o	Anhydrides with branched hydrocarbon chains^o
Oxygenated Derivatives^o	Anhydrides^o	Unsaturated Aliphatic	Anhydrides with unsaturated

[63]

Oxygenated Derivatives	Epoxides	Aromatic Epoxides	(saturated or unsaturated) Epoxides with aromatic rings
Oxygenated Derivatives	Epoxides	Alkyl Poly Epoxides	Epoxides with multiple -COC- groups and alkyl chains
Oxygenated Derivatives	Epoxides	Aromatic Poly Epoxides	Epoxides with multiple -COC- groups and aromatic rings
Oxygenated Derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Oxygen Derivatives	Hydrocarbons composed of C,H,O and cannot be classified by above list
Oxy-halogenate Derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Oxygen-Halogen Derivatives	Hydrocarbons composed of C,H,O,F,Cl,Br,I and cannot be classified by above list
Oxygen-Phosphorus Derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Oxygen-Phosphorus Derivatives	Hydrocarbons composed of C,H,O,P and cannot be classified by above list
Oxygen-Silicon Derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Oxygen-Silicon Derivatives	Hydrocarbons composed of C,H,O,Si and cannot be classified by above list
Nitrogen Derivatives	Amines	n- Aliphatic Amines	Amines with a straight hydrocarbon chain
Nitrogen Derivatives	Amines	Branched Aliphatic Amines	Amines with branched hydrocarbon chains
Nitrogen Derivatives	Amines	Unsaturated Aliphatic Amines	Amines with unsaturated hydrocarbon chains
Nitrogen Derivatives	Amines	Cyclic Aliphatic Amines	Amines with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Nitrogen Derivatives	Amines	Aromatic Amines	Amines with aromatic rings
Nitrogen Derivatives	Amines	Alkyl Poly Amines	Amines with multiple -N< groups and alkyl chains
Nitrogen Derivatives	Amines	Aromatic Poly Amines	Amines with multiple -N< groups and aromatic rings
Nitrogen Derivatives	Nitriles	n- Aliphatic Nitriles	Nitriles with a straight hydrocarbon chain
Nitrogen Derivatives	Nitriles	Branched Aliphatic Nitriles	Nitriles with branched hydrocarbon chains
Nitrogen Derivatives	Nitriles	Unsaturated Aliphatic Nitriles	Nitriles with unsaturated hydrocarbon chains
Nitrogen Derivatives	Nitriles	Cyclic Aliphatic Nitriles	Nitriles with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Nitrogen Derivatives	Nitriles	Aromatic Nitriles	Nitriles with aromatic rings
Nitrogen Derivatives	Nitriles	Alkyl Poly Nitriles	Nitriles with multiple -CN groups and alkyl chains

[64]

Nitrogen Derivatives	Nitriles	Aromatic Poly Nitriles	Nitriles with multiple -CN groups and aromatic rings
Nitrogen Derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Nitrogen Derivatives	Hydrocarbons composed of C,H,N and cannot be classified by above list
Oxy-Nitrogen Derivatives	Nitro Derivatives	n- Aliphatic Nitro-Derivatives	Nitro-Derivatives with a straight hydrocarbon chain
Oxy-Nitrogen Derivatives	Nitro Derivatives	Branched Aliphatic Nitro-Derivatives	Nitro-Derivatives with branched hydrocarbon chains
Oxy-Nitrogen Derivatives	Nitro Derivatives	Unsaturated Aliphatic Nitro-Derivatives	Nitro-Derivatives with unsaturated hydrocarbon chains
Oxy-Nitrogen Derivatives	Nitro Derivatives	Cyclic Aliphatic Nitro-Derivatives	Nitro-Derivatives with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Oxy-Nitrogen Derivatives	Nitro Derivatives	Aromatic Nitro-Derivatives	Nitro-Derivatives with aromatic rings
Oxy-Nitrogen Derivatives	Nitro Derivatives	Alkyl Poly Nitro-Derivatives	Nitro-Derivatives with multiple -NO₂ groups and alkyl chains
Oxy-Nitrogen Derivatives	Nitro Derivatives	Aromatic Poly Nitro-Derivatives	Nitro-Derivatives with multiple -NO₂ groups and aromatic rings
Oxy-Nitrogen Derivatives	Amides	n- Aliphatic Amides	Amides with a straight hydrocarbon chain
Oxy-Nitrogen Derivatives	Amides	Branched Aliphatic Amides	Amides with branched hydrocarbon chains
Oxy-Nitrogen Derivatives	Amides	Unsaturated Aliphatic Amides	Amides with unsaturated hydrocarbon chains
Oxy-Nitrogen Derivatives	Amides	Cyclic Aliphatic Amides	Amides with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Oxy-Nitrogen Derivatives	Amides	Aromatic Amides	Amides with aromatic rings
Oxy-Nitrogen Derivatives	Amides	Alkyl Poly Amides	Amides with multiple -CON< groups and alkyl chains
Oxy-Nitrogen Derivatives	Amides	Aromatic Poly Amides	Amides with multiple -CON< groups and aromatic rings
Oxy-Nitrogen Derivatives	Amides	Unclassified Hydrocarbon Nitrogen-Oxygen Derivatives	Hydrocarbons composed of C,H,O,N and cannot be classified by above list
Nitrogen-halogen Derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Nitrogen-Halogen Derivatives	Hydrocarbons composed of C,H,O,F,Cl,Br,I and cannot be classified by above list
Nitrogen-Phosphorus Derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Nitrogen-Phosphorus Derivatives	Hydrocarbons composed of C,H,O,P and cannot be classified by above list

[65]

Nitrogen-Silicon Derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Nitrogen-Silicon Derivatives	Hydrocarbons composed of C,H,O,Si and cannot be classified by above list
Nitrogen-Sulfur Derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Nitrogen-Sulfur Derivatives	Hydrocarbons composed of C,H,O,S and cannot be classified by above list
Halogenated Derivatives	Fluorine Derivatives	n-Aliphatic Fluorine Derivatives	Fluorine Derivatives with a straight hydrocarbon chain
Halogenated Derivatives	Fluorine Derivatives	Branched Aliphatic Fluorine Derivatives	Fluorine Derivatives with branched hydrocarbon chains
Halogenated Derivatives	Fluorine Derivatives	Unsaturated Aliphatic Fluorine Derivatives	Fluorine Derivatives with unsaturated hydrocarbon chains
Halogenated Derivatives	Fluorine Derivatives	Cyclic Aliphatic Fluorine Derivatives	Fluorine Derivatives with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Halogenated Derivatives	Fluorine Derivatives	Aromatic Fluorine Derivatives	Fluorine Derivatives with aromatic rings
Halogenated Derivatives	Chlorine Derivatives	n-Aliphatic Chlorine Derivatives	Chlorine Derivatives with a straight hydrocarbon chain
Halogenated Derivatives	Chlorine Derivatives	Branched Aliphatic Chlorine Derivatives	Chlorine Derivatives with branched hydrocarbon chains
Halogenated Derivatives	Chlorine Derivatives	Unsaturated Aliphatic Chlorine Derivatives	Chlorine Derivatives with unsaturated hydrocarbon chains
Halogenated Derivatives	Chlorine Derivatives	Cyclic Aliphatic Chlorine Derivatives	Chlorine Derivatives with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Halogenated Derivatives	Chlorine Derivatives	Aromatic Chlorine Derivatives	Chlorine Derivatives with aromatic rings
Halogenated Derivatives	Bromine Derivatives	n-Aliphatic Bromine Derivatives	Bromine Derivatives with a straight hydrocarbon chain
Halogenated Derivatives	Bromine Derivatives	Branched Aliphatic Bromine Derivatives	Bromine Derivatives with branched hydrocarbon chains
Halogenated Derivatives	Bromine Derivatives	Unsaturated Aliphatic Bromine Derivatives	Bromine Derivatives with unsaturated hydrocarbon chains
Halogenated Derivatives	Bromine Derivatives	Cyclic Aliphatic Bromine Derivatives	Bromine Derivatives with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Halogenated Derivatives	Bromine Derivatives	Aromatic Bromine Derivatives	Bromine Derivatives with aromatic rings
Halogenated Derivatives	Iodine Derivatives	n-Aliphatic Iodine Derivatives	Iodine Derivatives with a straight hydrocarbon chain
Halogenated Derivatives	Iodine Derivatives	Branched Aliphatic Iodine Derivatives	Iodine Derivatives with branched hydrocarbon chains
Halogenated Derivatives	Iodine Derivatives	Unsaturated Aliphatic Iodine Derivatives	Iodine Derivatives with unsaturated hydrocarbon

[66]

Halogenated Derivatives	Iodine Derivatives	Cyclic Aliphatic Iodine Derivatives	chains Iodine Derivatives with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Halogenated Derivatives	Iodine Derivatives	Aromatic Iodine Derivatives	Iodine Derivatives with aromatic rings
Halogenated Derivatives	Multi-Halogen Derivatives	n- Aliphatic Multi-Halogen Derivatives	Multi-Halogen Derivatives with a straight hydrocarbon chain
Halogenated Derivatives	Multi-Halogen Derivatives	Branched Aliphatic Multi-Halogen Derivatives	Multi-Halogen Derivatives with branched hydrocarbon chains
Halogenated Derivatives	Multi-Halogen Derivatives	Unsaturated Aliphatic Multi-Halogen Derivatives	Multi-Halogen Derivatives with unsaturated hydrocarbon chains
Halogenated Derivatives	Multi-Halogen Derivatives	Cyclic Aliphatic Multi-Halogen Derivatives	Multi-Halogen Derivatives with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Halogenated Derivatives	Multi-Halogen Derivatives	Aromatic Multi-Halogen Derivatives	Multi-Halogen Derivatives with aromatic rings
Halogenated Derivatives	Polyfunctional Halogen Derivatives	Unclassified Hydrocarbon Halogen derivatives	Hydrocarbons composed of C, H, F, Cl, Br, I and cannot be classified by above list
Sulfur Derivatives	Sulfides	n- Aliphatic Sulfides	Sulfides with a straight hydrocarbon chain
Sulfur Derivatives	Sulfides	Branched Aliphatic Sulfides	Sulfides with branched hydrocarbon chains
Sulfur Derivatives	Sulfides	Unsaturated Aliphatic Sulfides	Sulfides with unsaturated hydrocarbon chains
Sulfur Derivatives	Sulfides	Cyclic Aliphatic Sulfides	Sulfides with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Sulfur Derivatives	Sulfides	Aromatic Sulfides	Sulfides with aromatic rings
Sulfur Derivatives	Sulfides	Aromatic Poly Sulfides	Sulfides with multiple -S- groups and aromatic rings
Sulfur Derivatives	Sulfides	Alkyl Poly Sulfides	Sulfides with multiple -S- groups and alkyl chains
Sulfur Derivatives	Thiols	n- Aliphatic Thiols	Thiols with a straight hydrocarbon chain
Sulfur Derivatives	Thiols	Branched Aliphatic Thiols	Thiols with branched hydrocarbon chains
Sulfur Derivatives	Thiols	Unsaturated Aliphatic Thiols	Thiols with unsaturated hydrocarbon chains
Sulfur Derivatives	Thiols	Cyclic Aliphatic Thiols	Thiols with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Sulfur Derivatives	Thiols	Aromatic Thiols	Thiols with aromatic rings
Sulfur Derivatives	Thiols	Aromatic Poly Thiols	Thiols with multiple -SH groups and aromatic rings

[67]

Sulfur Derivatives	Thiols	Alkyl Poly Thiols	Thiols with multiple -SH groups and alkyl chains
Sulfur Derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Sulfur Derivatives	Hydrocarbons composed of C,H,S and cannot be classified by above list
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfites	n- Aliphatic Sulfites	Sulfites with a straight hydrocarbon chain
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfites	Branched Aliphatic Sulfites	Sulfites with branched hydrocarbon chains
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfites	Unsaturated Aliphatic Sulfites	Sulfites with unsaturated hydrocarbon chains
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfites	Cyclic Aliphatic Sulfites	Sulfites with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfites	Aromatic Sulfites	Sulfites with aromatic rings
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfites	Aromatic Poly Sulfites	Sulfites with multiple -O-S(=O)-O- Groups and aromatic rings
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfites	Alkyl Poly Sulfites	Sulfites with multiple -O-S(=O)-O- groups and alkyl chains
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfones	n- Aliphatic Sulfones	Sulfones with a straight hydrocarbon chain
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfones	Branched Aliphatic Sulfones	Sulfones with branched hydrocarbon chains
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfones	Unsaturated Aliphatic Sulfones	Sulfones with unsaturated hydrocarbon chains
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfones	Cyclic Aliphatic Sulfones	Sulfones with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfones	Aromatic Sulfones	Sulfones with aromatic rings
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfones	Aromatic Poly Sulfones	Sulfones with multiple -S(=O)(=O)- groups and aromatic rings
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfones	Alkyl Poly Sulfones	Sulfones with multiple -S(=O)(=O)- groups and alkyl chains
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfonic acids	n- Aliphatic Sulfonic acids	Sulfonic acids with a straight hydrocarbon chain
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfonic acids	Branched Aliphatic Sulfonic acids	Sulfonic acids with branched hydrocarbon chains
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfonic acids	Unsaturated Aliphatic Sulfonic acids	Sulfonic acids with unsaturated hydrocarbon chains
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfonic acids	Cyclic Aliphatic Sulfonic acids	Sulfonic acids with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Sulfur-oxygen Derivatives	Sulfonic acids	Aromatic Sulfonic	Sulfonic acids with aromatic

[68]

Derivatives[↙]		acids[↙]	rings[↙]
Sulfur-oxygen Derivatives[↙]	Sulfonic acids[↙]	Aromatic Poly Sulfonic acids[↙]	Sulfonic acids with multiple -O-S(=O)-OH Groups and aromatic rings[↙]
Sulfur-oxygen Derivatives[↙]	Sulfonic acids[↙]	Alkyl Poly Sulfonic acids[↙]	Sulfonic acids with multiple -O-S(=O)-OH Groups and alkyl chains[↙]
Sulfur-oxygen Derivatives[↙]	Sulfates[↙]	n- Aliphatic Sulfates[↙]	Sulfates with a straight hydrocarbon chain[↙]
Sulfur-oxygen Derivatives[↙]	Sulfates[↙]	Branched Aliphatic Sulfates[↙]	Sulfates with branched hydrocarbon chains[↙]
Sulfur-oxygen Derivatives[↙]	Sulfates[↙]	Unsaturated Aliphatic Sulfates[↙]	Sulfates with unsaturated hydrocarbon chains[↙]
Sulfur-oxygen Derivatives[↙]	Sulfates[↙]	Cyclic Aliphatic Sulfates[↙]	Sulfates with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)[↙]
Sulfur-oxygen Derivatives[↙]	Sulfates[↙]	Aromatic Sulfates[↙]	Sulfates with aromatic rings[↙]
Sulfur-oxygen Derivatives[↙]	Sulfates[↙]	Aromatic Poly Sulfates[↙]	Sulfate with multiple -O-S(=O)(=O)-O- groups and aromatic rings[↙]
Sulfur-oxygen Derivatives[↙]	Sulfates[↙]	Alkyl Poly Sulfates[↙]	Sulfate with multiple -O-S(=O)(=O)-O- groups and alkyl chains[↙]
Sulfur-oxygen Derivatives[↙]	Polyfunctional Sulfur Derivatives[↙]	Unclassified Hydrocarbon Oxygen-Sulfur Derivatives[↙]	Hydrocarbons composed of C,H,O,S and cannot be classified by above list[↙]
Hydrocarbon Phosphorus Derivatives[↙]	Phosphines[↙]	n- Aliphatic Phosphines[↙]	Phosphines with a straight hydrocarbon chain[↙]
Hydrocarbon Phosphorus Derivatives[↙]	Phosphines[↙]	Branched Aliphatic Phosphines[↙]	Phosphines with branched hydrocarbon chains[↙]
Hydrocarbon Phosphorus Derivatives[↙]	Phosphines[↙]	Unsaturated Aliphatic Phosphines[↙]	Phosphines with unsaturated hydrocarbon chains[↙]
Hydrocarbon Phosphorus Derivatives[↙]	Phosphines[↙]	Cyclic Aliphatic Phosphines[↙]	Phosphines with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)[↙]
Hydrocarbon Phosphorus Derivatives[↙]	Phosphines[↙]	Aromatic Phosphines[↙]	Phosphines with aromatic rings[↙]
Hydrocarbon Phosphorus Derivatives[↙]	Phosphines[↙]	Aromatic Poly Phosphines[↙]	Phosphines with multiple -P-Groups and aromatic rings[↙]
Hydrocarbon Phosphorus Derivatives[↙]	Phosphines[↙]	Alkyl Poly Phosphines[↙]	Phosphines with multiple -P-Groups and alkyl chains[↙]
Hydrocarbon Phosphorus	Polyfunctional[↙]	Unclassified Hydrocarbon	Hydrocarbons composed of C,H,P and cannot be

[69]

Derivatives		Phosphorus Derivatives	classified by above list
Phosphorus-halogen derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Phosphorus-Halogen Derivatives	Hydrocarbons composed of C, H, P, F, Cl, Br, I and cannot be classified by above list
Phosphorus-silicon derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Phosphorus-Silicon Derivatives	Hydrocarbons composed of C, H, P, Si and cannot be classified by above list
Phosphorus-sulfur derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Phosphorus-Sulfur Derivatives	Hydrocarbons composed of C, H, P, S and cannot be classified by above list
Sulfur-halogen derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Sulfur-Halogen Derivatives	Hydrocarbons composed of C, H, S, F, Cl, Br, I and cannot be classified by above list
Silicon-sulfur derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Silicon-Sulfur Derivatives	Hydrocarbons composed of C, H, S, Si and cannot be classified by above list
Silicon-halogen derivatives	Polyfunctional	Unclassified Hydrocarbon Silicon-Halogen Derivatives	Hydrocarbons composed of C, H, Si, F, Cl, Br, I and cannot be classified by above list
Silicon Derivatives	Silanes	n-Aliphatic Silanes	Silanes with a straight hydrocarbon chain
Silicon Derivatives	Silanes	Branched Aliphatic Silanes	Silanes with branched hydrocarbon chains
Silicon Derivatives	Silanes	Unsaturated Aliphatic Silanes	Silanes with unsaturated hydrocarbon chains
Silicon Derivatives	Silanes	Cyclic Aliphatic Silanes	Silanes with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Silicon Derivatives	Silanes	Aromatic Silanes	Silanes with aromatic rings
Silicon Derivatives	Siloxanes	n-Aliphatic Siloxanes	Siloxanes with a straight hydrocarbon chain
Silicon Derivatives	Siloxanes	Branched Aliphatic Siloxanes	Siloxanes with branched hydrocarbon chains
Silicon Derivatives	Siloxanes	Unsaturated Aliphatic Siloxanes	Siloxanes with unsaturated hydrocarbon chains
Silicon Derivatives	Siloxanes	Cyclic Aliphatic Siloxanes	Siloxanes with cyclic hydrocarbon chains (saturated or unsaturated)
Silicon Derivatives	Siloxanes	Aromatic Siloxanes	Siloxanes with aromatic rings
Silicon Derivatives	Polyfunctional Halogen Derivatives	Unclassified Hydrocarbon Silicon derivatives	Hydrocarbons composed of C, H, O, Si and cannot be classified by above list
Hydrocarbon Derivatives	Polyfunctional Hydrocarbon Derivatives	Unclassified Hydrocarbon Derivatives	Hydrocarbons composed of C, H, O, N, S, Si, F, Cl, Br, I and cannot be classified by above list

[70]	Elements[↗]	Elements[↗]	Elements[↗]	Chemicals composed of only atomic constituents[↗]
	Inorganic[↗]	Inorganic[↗]	Inorganic compound[↗]	Chemicals without C, H and O, exceptions are, C, CO, CO₂ ...[↗]
	Organic/Inorganic[↗]	Organic/Inorganic[↗]	Organic/Inorganic[↗]	Chemical with organic group and other inorganic atoms[↗]
	Inorganic[↗]	Inorganic[↗]	Inorganic salt[↗]	Ionic compound containing an inorganic ion[↗]
	Organic salts[↗]	Organic salts[↗]	Organic salts[↗]	Ionic compound containing an organic ion[↗]

[71]

[72] 표 4에 나타낸 바와 같이, 유기화합물에 대해서 화합물 식별자 중 InChI를 이용하여 작용기와 구조를 확인함으로써 유기화합물을 데이터베이스 내에서 짧은 시간 내에 효과적으로 분류할 수 있다. 검색속도와 정확성을 향상시키며 화합물의 물성 예측 또한 용이해지는 효과가 있다.

[73]

산업상 이용가능성

[74] 본 발명에 따르면, 비슷하지만 다른 구조를 가진 화합물의 작용기 구분 및 특정 작용기 및 구조가 포함된 물질을 보다 정확하게 분류할 수 있으며, 이를 통해 데이터베이스 사용자가 화합물의 특성을 더욱 쉽게 확인할 수 있고, 구조와 작용기로부터 야기되는 물성을 분석하는데 사용될 수 있다.

[75]

[76] 이상으로 본 발명 내용의 특정한 부분을 상세히 기술하였는 바, 당업계의 통상의 지식을 가진 자에게 있어서 이러한 구체적 기술은 단지 바람직한 실시 양태일 뿐이며, 이에 의해 본 발명의 범위가 제한되는 것이 아닌 점은 명백할 것이다. 따라서, 본 발명의 실질적인 범위는 첨부된 청구항들과 그것들의 등가물에 의하여 정의된다고 할 것이다.

청구범위

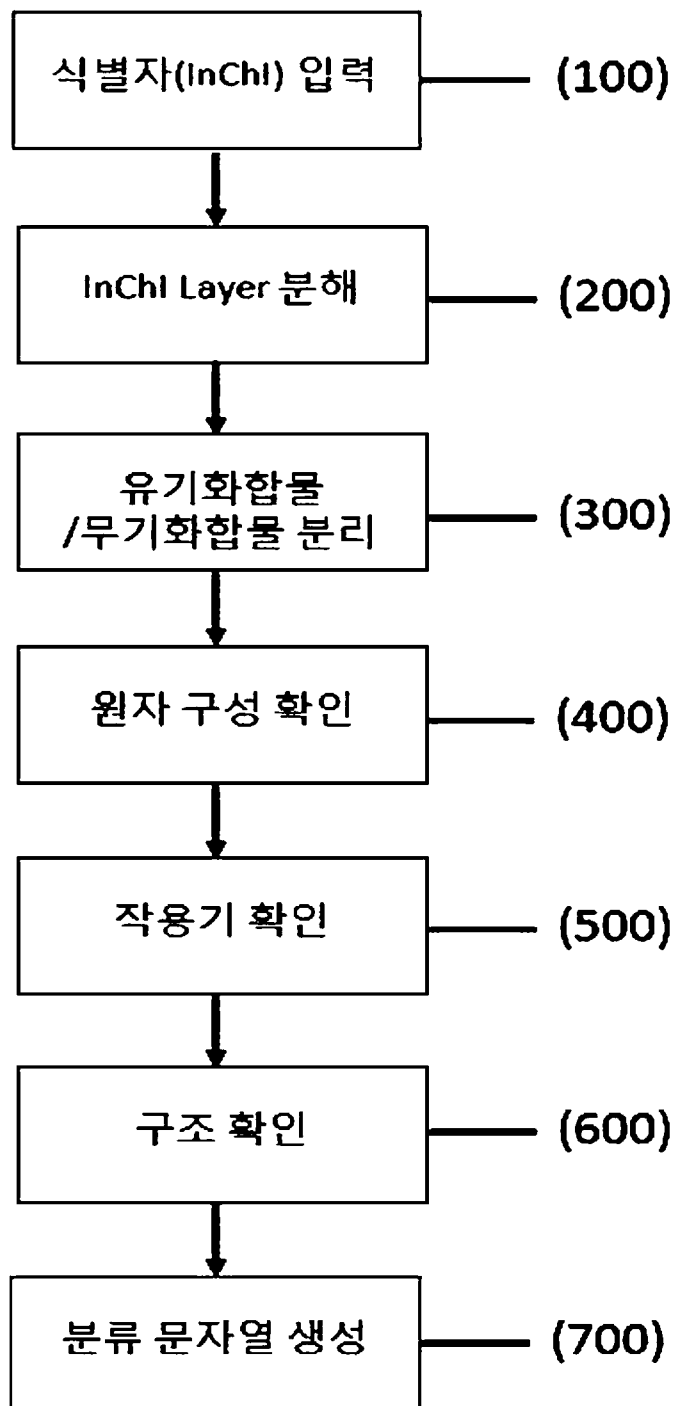
- [청구항 1] 다음 단계를 포함하는 화합물의 분류방법:
(a) 화합물의 InChI(International Chemical Identifier) 식별자를 입력하는 단계;
(b) 상기 식별자를 이용하여 레이어(layer)를 분류하여 유기화합물 또는 무기화합물인지 확인하는 단계;
(c) 무기화합물인 경우에는 분류를 수행하지 않고, 유기화합물인 경우에는 구성 원자 성분을 확인하여 원자 클래스(atomic class)를 결정하는 단계;
(d) 작용기를 확인하여 메인 클래스(main class)를 결정하는 단계;
(e) 구조를 확인하여 서브 클래스(sub class)를 결정하는 단계; 및
(f) 원자 클래스, 메인 클래스 및 서브 클래스를 포함하는 분류 문자열을 생성하는 단계.
- [청구항 2] 제1항에 있어서, 상기 레이어는 메인 레이어(main layer) 및 전하 레이어(charge layer)로 분류하는 것을 특징으로 하는 화합물의 분류방법.
- [청구항 3] 제2항에 있어서, 상기 메인 레이어(main layer)는 접두사에 따라서 구분되며, 접두사를 제거한 후 화학식 레이어, 원자연결 레이어 또는 수소 레이어로 분류하는 것을 특징으로 하는 화합물의 분류방법.
- [청구항 4] 제2항에 있어서, 상기 전하 레이어(charge layer)는 접두사에 따라서 구분되며, 접두사를 제거한 후 전하 레이어 또는 양전하로 분류하는 것을 특징으로 하는 화합물의 분류방법.
- [청구항 5] 제3항에 있어서, 상기 화학식 레이어를 확인하여 무기화합물과 유기화합물을 구분하되, 화학식 레이어에 탄소가 존재하지 않거나 수소 레이어가 존재하지 않는 경우는 무기화합물로 분류하고, 그 외의 경우는 유기화합물로 분류되고, 유기화합물 중에서 금속과 결합된 경우는 유기염으로 분류하는 것을 특징으로 하는 화합물의 분류방법.
- [청구항 6] 제1항에 있어서, 상기 원자 클래스(atomic class)를 결정하는 단계는 하기 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 화합물의 분류방법:
(a1) 화학식 레이어($i=0$)를 로드하는 단계;
(a2) 화학식 레이어의 문자 원자 레이어($i+1$)가 소문자($i=i+2$)인 경우에는 구성원자를 확인하고, 소문자가 아닌 경우에는 $i=i+1$ 처리한 후에 구성원자를 확인하는 단계;
(a3) 문자 원자 레이어(i)가 숫자인 경우에는 $i=i+1$ 처리한 후에 (a3)의 처음으로 가고, 숫자가 아닌 경우에는 원자의 개수를 확인하는 단계; 및
(a4) 문자열 종결인 경우에는 전체 단계를 종결하고, 종결이 아닌 경우에는 (a2) 단계로 가서 반복하는 단계.
- [청구항 7] 제1항에 있어서, 상기 작용기는 원자연결 레이어 및 수소 레이어에 따라

분류되는 것을 특징으로 하는 화합물의 분류방법.

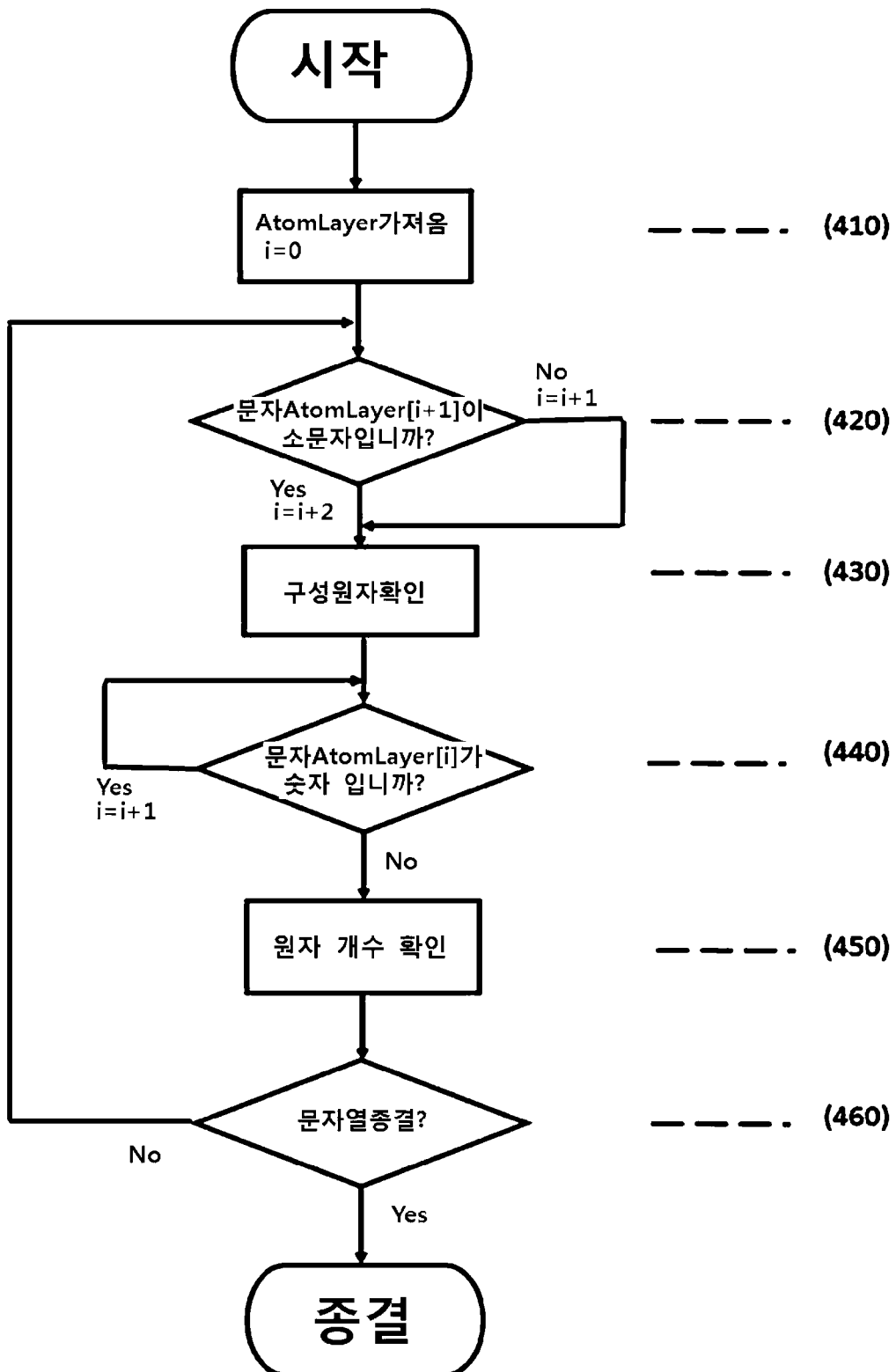
[청구항 8] 제7항에 있어서, 14족, 15족, 16족 및 17족의 원소인 경우, 알칸(alkane), 알켄(alkene), 알킨(alkyne), 나프텐(naphthene), 아로마틱(aromatic), 아민, 아마이드, 니트로, 니트릴, 알코올, 케톤, 에테르, 아세탈, 펄록사이드, 에폭사이드, 알데히드, 카복실산, 에스테르, 안하이드라이드, 클로라이드, 플루오라이드, 브로마이드, 아이오다이드, 설파이드(sulfide), 티올, 설파이트(sulfite), 설펜(sulfone), 설펜산(sulfonic acid), 설펜레이트(sulfate), 포스핀(phosphine), 실란(silane) 또는 실록산(siloxane)의 작용기로 분류되는 것을 특징으로 하는 화합물의 분류방법.

[청구항 9] 제1항에 있어서, 상기 구조는 상기 원자연결 레이어에서 가지 또는 수소연결 레이어를 통해 노르말(N-), 브랜치(Branched-), 불포화(Unsaturated-), 폴리(Poly-), 사이클릭(Cyclic-) 또는 방향족(Aromatic-)으로 메인 클래스의 접두사로 분류되거나 서브 클래스로 분류되는 것을 특징으로 하는 화합물의 분류방법.

[도1]



[도2]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2016/009273**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 19/00; G06F 15/16; G06G 7/48; G06F 17/30

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), Google Search Engine & Keywords: compound, classification, molecular, organic compound, inorganic compound, atomic class (atomic class), string, prefix, electric charge, hydrogen, carbon

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	KR 10-1236966 B1 (FOUNDATION OF SOONGSIL UNIVERSITY-INDUSTRY COOPERATION) 26 February 2013 See paragraphs [0019], [0079]; claim 1; and figure 1.	1-5,7-9
A		6
Y	VILLANUEVA-ROSALES, Natalia et al., "Describing Chemical Functional Groups in OWL-DL for the Classification of Chemical Compounds", CEUR Workshop Proceedings, Innsbruck, Austria, 2007, vol. 258. <URL: http://ceur-ws.org/Vol-258/paper28.pdf > See sections 2.1 and 2.1.1.	1-5,7-9
Y	US 2012-0109972 A1 (BOYER, Stephen Kane et al.) 03 May 2012 See paragraphs [0051]-[0052], [0062]; and figure 8.	2-5
A	KR 10-2012-0085178 A (CHEMESSSEN, INC.) 31 July 2012 See paragraphs [0013]-[0030]; and figures 1-15.	1-9
A	US 2008-0234996 A1 (GHOSH, Anirban et al.) 25 September 2008 See paragraphs [0044]-[0098]; and figures 1-25.	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

25 NOVEMBER 2016 (25.11.2016)

Date of mailing of the international search report

25 NOVEMBER 2016 (25.11.2016)

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/KR2016/009273

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-1236966 B1	26/02/2013	US 2013-0124152 A1	16/05/2013
		US 2016-0048661 A1	18/02/2016
US 2012-0109972 A1	03/05/2012	US 2008-0004810 A1	03/01/2008
		US 8140267 B2	20/03/2012
		US 8515684 B2	20/08/2013
KR 10-2012-0085178 A	31/07/2012	KR 10-1258859 B1	29/04/2013
		KR 10-1258863 B1	29/04/2013
		KR 10-1262045 B1	08/05/2013
		KR 10-1267356 B1	24/05/2013
		KR 10-1267369 B1	24/05/2013
		KR 10-1267372 B1	24/05/2013
		KR 10-1267373 B1	24/05/2013
		KR 10-1267376 B1	24/05/2013
		KR 10-1267381 B1	24/05/2013
		KR 10-1267385 B1	24/05/2013
		KR 10-1267386 B1	27/05/2013
		KR 10-1267391 B1	24/05/2013
		KR 10-1267408 B1	30/05/2013
		KR 10-1267418 B1	30/05/2013
		KR 10-1289322 B1	24/07/2013
		KR 10-1289323 B1	24/07/2013
		KR 10-1295859 B1	12/08/2013
		KR 10-1295861 B1	12/08/2013
		KR 10-1295865 B1	12/08/2013
		KR 10-1297211 B1	16/08/2013
		KR 10-1300628 B1	28/08/2013
		KR 10-1300629 B1	28/08/2013
		KR 10-1300633 B1	28/08/2013
		KR 10-1302460 B1	10/09/2013
		KR 10-1313021 B1	01/10/2013
		KR 10-1313026 B1	01/10/2013
		KR 10-1313030 B1	01/10/2013
		KR 10-1313031 B1	01/10/2013
		KR 10-1313035 B1	01/10/2013
		KR 10-1313036 B1	01/10/2013
		KR 10-1313037 B1	01/10/2013
		KR 10-1325097 B1	06/11/2013
		KR 10-1325101 B1	06/11/2013
		KR 10-1325103 B1	06/11/2013
		KR 10-1325107 B1	06/11/2013
		KR 10-1325112 B1	06/11/2013
		KR 10-1325117 B1	06/11/2013
		KR 10-1325120 B1	06/11/2013
		KR 10-1325124 B1	06/11/2013
		KR 10-1325125 B1	06/11/2013
		WO 2012-177108 A2	27/12/2012
		WO 2012-177108 A3	11/04/2013

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2016/009273

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
US 2008-0234996 A1	25/09/2008	US 2008-0234135 A1	25/09/2008
		US 8468001 B2	18/06/2013
		US 8468002 B2	18/06/2013

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

G06F 19/00(2011.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

G06F 19/00; G06F 15/16; G06G 7/48; G06F 17/30

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), Google Search Engine & 키워드: 화합물, 분류, 분자, 유기화합물, 무기화합물, 원자 클래스(atomic class), 문자열, 접두사, 전하, 수소, 탄소

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
Y	KR 10-1236966 B1 (승실대학교산학협력단) 2013.02.26 단락 [0019], [0079]; 청구항 1; 및 도면 1 참조.	1-5, 7-9
A		6
Y	NATALIA VILLANUEVA-ROSALES 등, `Describing Chemical Functional Groups in OWL-DL for the Classification of Chemical Compounds`, CEUR Workshop Proceedings, Innsbruck, Austria, 2007, Vol 258. <URL: http://ceur-ws.org/Vol-258/paper28.pdf > 섹션 2.1 및 2.1.1 참조.	1-5, 7-9
Y	US 2012-0109972 A1 (STEPHEN KANE BOYER 등) 2012.05.03 단락 [0051]-[0052], [0062]; 및 도면 8 참조.	2-5
A	KR 10-2012-0085178 A (주식회사 켄에쎌) 2012.07.31 단락 [0013]-[0030]; 및 도면 1-15 참조.	1-9
A	US 2008-0234996 A1 (ANIRBAN GHOSH 등) 2008.09.25 단락 [0044]-[0098]; 및 도면 1-25 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 11월 25일 (25.11.2016)

국제조사보고서 발송일

2016년 11월 25일 (25.11.2016)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소

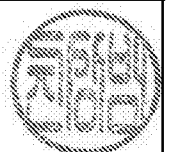
대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관

진상범

전화번호 +82-42-481-8398



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-1236966 B1	2013/02/26	US 2013-0124152 A1 US 2016-0048661 A1	2013/05/16 2016/02/18
US 2012-0109972 A1	2012/05/03	US 2008-0004810 A1 US 8140267 B2 US 8515684 B2	2008/01/03 2012/03/20 2013/08/20
KR 10-2012-0085178 A	2012/07/31	KR 10-1258859 B1 KR 10-1258863 B1 KR 10-1262045 B1 KR 10-1267356 B1 KR 10-1267369 B1 KR 10-1267372 B1 KR 10-1267373 B1 KR 10-1267376 B1 KR 10-1267381 B1 KR 10-1267385 B1 KR 10-1267386 B1 KR 10-1267391 B1 KR 10-1267408 B1 KR 10-1267418 B1 KR 10-1289322 B1 KR 10-1289323 B1 KR 10-1295859 B1 KR 10-1295861 B1 KR 10-1295865 B1 KR 10-1297211 B1 KR 10-1300628 B1 KR 10-1300629 B1 KR 10-1300633 B1 KR 10-1302460 B1 KR 10-1313021 B1 KR 10-1313026 B1 KR 10-1313030 B1 KR 10-1313031 B1 KR 10-1313035 B1 KR 10-1313036 B1 KR 10-1313037 B1 KR 10-1325097 B1 KR 10-1325101 B1 KR 10-1325103 B1 KR 10-1325107 B1 KR 10-1325112 B1 KR 10-1325117 B1 KR 10-1325120 B1 KR 10-1325124 B1 KR 10-1325125 B1 WO 2012-177108 A2 WO 2012-177108 A3	2013/04/29 2013/04/29 2013/05/08 2013/05/24 2013/05/24 2013/05/24 2013/05/24 2013/05/24 2013/05/24 2013/05/24 2013/05/27 2013/05/24 2013/05/30 2013/05/30 2013/07/24 2013/07/24 2013/08/12 2013/08/12 2013/08/12 2013/08/16 2013/08/28 2013/08/28 2013/08/28 2013/09/10 2013/10/01 2013/10/01 2013/10/01 2013/10/01 2013/10/01 2013/10/01 2013/10/01 2013/10/01 2013/10/01 2013/10/01 2013/10/01 2013/11/06 2013/11/06 2013/11/06 2013/11/06 2013/11/06 2013/11/06 2013/11/06 2013/11/06 2013/11/06 2013/11/06 2012/12/27 2013/04/11

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
US 2008-0234996 A1	2008/09/25	US 2008-0234135 A1	2008/09/25
		US 8468001 B2	2013/06/18
		US 8468002 B2	2013/06/18