



등록특허 10-2449732



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년09월30일

(11) 등록번호 10-2449732

(24) 등록일자 2022년09월27일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

G01N 15/00 (2017.01) G06F 15/16 (2018.01)

(52) CPC특허분류

G01N 15/00 (2013.01)

G06F 15/16 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2021-0042467

(22) 출원일자 2021년04월01일

심사청구일자 2021년04월01일

(56) 선행기술조사문헌

KR1020140142553 A

JP2008292412 A

JP2018071978 A

(73) 특허권자

중앙대학교 산학협력단

서울특별시 동작구 흑석로 84 (흑석동)

연세대학교 산학협력단

서울특별시 서대문구 연세로 50 (신촌동, 연세대학교)

(72) 발명자

성재영

서울특별시 마포구 신수로 15, 105동 104호(현석동, 강변힐스테이트)

김지현

경기도 광명시 목감로 96, 106동 2202호(광명동, 월드메르디앙아파트)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

남건필, 박중수, 차상윤

전체 청구항 수 : 총 5 항

심사관 : 인치현

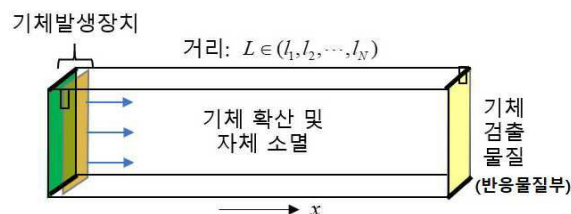
(54) 발명의 명칭 대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 방법

(57) 요약

본 발명은 대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 내용에 관한 것이다.

이러한 방법을 이용함으로써 독성이 있을 수 있는 기체에 대해 무해화 시간 및 확산 거리를 미리 예측하고 측정함으로써 실제 제품에 이용시 더욱 안전하게 이용을 할 수 있게 된다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

G01N 2015/0007 (2013.01)

(72) 발명자

송상근

서울특별시 동작구 흑석로3길 30, 104호(흑석동)

김용록

경기도 광주시 남종면 태허정로 389

왕강균

인천광역시 서구 검단로768번길 19, 105동 401호(불로동, 불로동금호어울림아파트)

정승진

서울특별시 강동구 구천면로 557, 3동 906호(상일동, 명일중앙하이츠아파트)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1711119011
 과제번호 2015R1A3A2066497
 부처명 과학기술정보통신부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 개인기초연구(과기정통부)(R&D)
 연구과제명 확률적 생체 반응 속도론 개발 및 생명체 기능 조절 능력의 정량적 이해
 기 여 율 30/100
 과제수행기관명 중앙대학교
 연구기간 2020.06.01 ~ 2021.03.31

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1711114474
 과제번호 2017R1A5A1015365
 부처명 과학기술정보통신부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 집단연구지원(R&D)
 연구과제명 혼성계면 화학구조 연구센터
 기 여 율 25/100
 과제수행기관명 이화여자대학교
 연구기간 2020.03.01 ~ 2021.02.28

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1711084030
 과제번호 2016R1A2B4011155
 부처명 과학기술정보통신부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 개인기초연구(과기정통부)(R&D)
 연구과제명 4차원(x,y,z,t)적 유효활성산소종의 에너지 동역학적 특성 연구
 기 여 율 25/100
 과제수행기관명 연세대학교
 연구기간 2019.03.01 ~ 2019.05.31

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1345267060
 과제번호 2009-0093817
 부처명 교육부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 이공학학술연구기반구축
 연구과제명 신기능이미징연구소
 기 여 율 5/100
 과제수행기관명 중앙대학교
 연구기간 2019.03.01 ~ 2019.05.31

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1711119403
 과제번호 2020R1A5A1018052
 부처명 과학기술정보통신부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 집단연구지원(R&D)
 연구과제명 나노-광 융합 바이오의료 진단 연구센터
 기 여 율 15/100
 과제수행기관명 중앙대학교
 연구기간 2020.07.01 ~ 2021.05.31

공지예외적용 : 있음

명세서

청구범위

청구항 1

- 1) 일면에 특정 기체를 발생시키는 기체 발생 장치를 배치하고, 상기 일면과 대향하는 타면에 상기 특정 기체와 반응하는 물질을 포함한 반응 물질부를 배치하는 단계;
- 2) 상기 기체 발생 장치 및 상기 반응 물질부 사이의 거리를 변경시키면서 발생된 기체와 반응하는 물질이 반응하지 않고 남아 있는 농도를 시간에 따라 측정하여 데이터를 얻는 단계;
- 3) 하기 수학식 (1) 및 (2)와 같은 수학식을 준비하는 단계;

$$\frac{\partial}{\partial t} R(x,t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} R(x,t) - \gamma R(x,t) + \delta(x) P_0 - \kappa \delta(x-L) C(L,t) R(L,t) \quad (1)$$

$$\frac{dC(L,t)}{dt} = -\kappa C(L,t) R(L,t) \quad (2)$$

D는 기체의 공기중 확산 계수, γ 는 기체가 공기 중에서 바닥상태로 전이되는 과정의 일차속도상수, P_0 는 기체가 발생평면에서 단위면적당 생성되는 속도 혹은 유량(flux)이며, κ 는 기체가 반응평면에서 반응물질과 일으키는 산화반응의 이분자반응 속도계수를 나타내고,

- 4) 상기 수학식 (1) 및 상기 수학식 (2)를 풀어서 C(L,t)가 측정 시간(t) 및 발생 평면 위치(L)에 의존하는 결과를 얻는 단계;
- 5) 4) 단계에서 얻어진 결과가 2) 단계에서 얻어진 데이터에 맞도록 비선형 함수 최적화 과정을 통해 γ 및 τ 를 결정하는 단계; 및
- 6) 5) 단계에서 얻어진 γ 의 역수를 구하여 특정 기체의 생존 시간(t) 및 확산거리($\sqrt{2D\gamma^{-1}}$)를 구하는 단계를 포함하는,

대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 방법.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

공기 중 특정 기체의 평균 생존시간은 특정 기체가 바닥상태 산소로의 전환 속도 상수의 역수인,

대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 방법.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 특정 기체는 단일항 산소인,

대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 방법.

청구항 4

제 1 항에 있어서,

특정 기체 및 특정 기체와 반응하는 물질의 화학 반응은 특정 기체의 농도와 특정 기체와 반응하는 물질의 농도

의 곱에 비례하는 이차 반응인,
대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 방법.

청구항 5

제 4 항에 있어서,
화학 반응이 진행될수록 특정 기체와 반응하는 물질의 농도는 시간에 따라 감소하는,
대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 방법.

청구항 6

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 내용에 관한 것이다.

[0002] 이러한 방법을 이용함으로써 독성이 있을 수 있는 기체에 대해 무해화 시간 및 확산 거리를 미리 예측하고 측정함으로써 실제 제품에 이용시 더욱 안전하게 이용을 할 수 있게 된다.

배경 기술

[0004] 기체의 확산 거리 및 생존 시간에 대한 연구는 특히 단일항 산소에서 많이 이루어졌왔다.

[0005] 단일항 산소는 첫 번째 들뜬 상태에 있는 산소분자를 지칭하는 것으로 1928년밀리컨에 의해 처음으로 발견되었다. 그 이후 1960년대부터 단일항 산소의 생성과 소멸과정에 대해 많은 연구가 진행되었다. Badger, Wright, 그리고 Whitlock는 처음으로 단일항 산소의 복사 생존시간 (radiative lifetime)에 대한 수식을 제공하였다. 이 수식에 따르면, 단일항 산소의 복사 생존시간은 1기압 산소 기체 하에서 13분임을 밝혔다. 1970년대에는 오존의 광분해, 산소의 방전, 혹은 감광 물질 등으로 단일항 산소를 발생시켜 다른 기체 분자들과의 충돌 감쇄가 단일항 산소의 생존시간에 미치는 영향을 연구하였다. 이 방법을 통해 1기압 산소 기체 하에서 단일항 산소의 생존시간은 10 마이크로초임을 알아내었다. 하지만 1980년대에 Einserberg 과 공동연구자들의 실험에서 레이저를 통해 만들어진 단일항 산소가 바닥상태로 전이가 일어날 때까지의 시간을 측정하였는데, 이때 측정된 단일항 산소의 생존시간은 상압의 산소 기체 하에서 0.124초였다. 1980년대와 1990년대 초에는 감광 물질을 이용해 단일항 산소를 발생시켜 온도에 따른 액체 내 단일항 산소의 생존시간을 측정하였다. 이렇게 측정된 단일항 산소의 생존시간은 절대온도 273~283 K, 습도가 100%인 공기 1기압 하에서 35~86 마이크로초였다. Midden과 Dahl은 각각 1989년과 1992년에 단일항 산소의 항균효과를 활용하여 액체상에서 단일항 산소의 생존시간을 측정한 바가 있다. 해당 실험에 따르면 박테리아의 종류에 따라 24~50 밀리초의 생존시간을 가진다.

[0006] 단일항 산소의 생존시간을 측정하는 또 다른 방법으로 전자 상자 공명 (Electron paramagnetic resonance, EPR)이 있다. 이 방법을 활용하여 Hasegawa와 공동연구자들은 절대온도 305 K, 압력 0.6 Torr인 산소-옥타플루오로나프탈렌(octafluoronaphthalene) 하에 단일항 산소의 생존시간이 7초임을 밝혔다. 그리고 Ruzzi와 공동연구자들도 EPR 방법을 통해 단일항 산소의 생존시간을 측정하였다. 이때 단일항 산소는 감광 물질과 방전 방법을 결합해 발생시켰으며, 절대온도 293 K, 0.4 Torr 산소 기체 하에서 단일항 산소의 생존시간이 0.4 초임을 보고하였다.

[0007] 최근 Majima와 공동연구자들이 단일 형광 이미징 방법을 활용하여 상온, 상압 조건에서 산화티타늄으로부터 발생 및 확산이 일어나는 단일항 산소의 공간 분포를 얻어내었지만 단일항 산소의 생존시간을 따로 측정하지는 않았다. 산화티타늄으로부터 발생한 단일항 산소의 생존시간은 Diamon과 Nosaka가 보고하였는데, 이때 측정된 단일항 산소의 생존시간은 산화티타늄에서 추가로 발생하는 과산화물 등으로 인해 공기 중의 단일항 산소의 생존시간보다 훨씬 짧은 수치였다.

[0008] 상기의 내용을 정리해 볼 때, 다양한 매질 하에서 단일항 산소의 생존시간이 많은 선행 연구들을 통해 밝혀져 있고, 조건에 따라 수 마이크로초에서 수십 분에 이르기까지 넓은 범위에서 달라짐을 확인할 수 있다. 최근에는 기체상태 매질에서 생성된 단일항 산소의 연구가 각광을 받고 있는데 예를 들면, 광화학 반응을 통해 생성되는 단일항 산소에 대한 연구와 리튬-공기 배터리를 충전하면서 생성되는 단일항 산소에 관한 연구가 이에 해당된다. 위에서 기술한 것과 같이 1960년대부터 기체 상태의 단일항 산소의 연구가 많이 이뤄졌음에도 불구하고, 일상적 대기 환경 하에서 단일항 산소의 수명과 확산 거리는 명확한 측정방법의 부재로 밝혀지지 않았다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0010] 본 발명은 일상적 대기 환경 하에서 특정 기체의 수명 및 확산 거리를 측정하기 위함이다.

과제의 해결 수단

[0012] 본 발명의 일 실시예에 따른 대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 방법은, 1) 일면에 특정 기체를 발생시키는 기체 발생 장치를 배치하고, 상기 일면과 대향하는 타면에 상기 특정 기체와 반응하는 물질을 포함한 반응 물질부를 배치하는 단계; 2) 상기 기체 발생 장치 및 상기 반응 물질부 사이의 거리를 변경 시키면서 발생된 기체와 반응하는 물질이 반응하지 않고 남아 있는 농도를 시간에 따라 측정하여 데이터를 얻는 단계; 3) 상기 수학식 (1) 및 (2)와 같은 수학식을 준비하는 단계;

$$[0013] \quad \frac{\partial}{\partial t} R(x,t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} R(x,t) - \gamma R(x,t) + \delta(x) P_0 - \kappa \delta(x-L) C(L,t) R(L,t) \quad (1)$$

$$[0014] \quad \frac{dC(L,t)}{dt} = -\kappa C(L,t) R(L,t) \quad (2)$$

[0015] D는 기체의 공기중 확산 계수, γ 는 기체가 공기 중에서 바닥상태로 전이되는 과정의 일차속도상수, P_0 는 기체가 발생평면에서 단위면적당 생성되는 속도 혹은 유량(flux)이며, κ 는 기체가 반응평면에서 반응물질과 일으키는 산화반응의 이분자반응 속도계수를 나타내고,

[0016] 4) 상기 수학식 (1) 및 상기 수학식 (2)를 풀어서 $C(L,t)$ 가 측정 시간(t) 및 발생 평면 위치(L)에 의존하는 결과를 얻는 단계; 5) 4) 단계에서 얻어진 결과가 2) 단계에서 얻어진 데이터에 맞도록 비선형 함수 최적화 과정을 통해 γ 및 τ 를 결정하는 단계; 및 6) 5) 단계에서 얻어진 γ 의 역수를 구하여 특정 기체의 생존 시간(t) 및 확산거리($\sqrt{2D\gamma^{-1}}$)를 구하는 단계를 포함한다.

[0017] 공기 중 특정 기체의 평균 생존시간은 특정 기체가 바닥상태 산소로의 전환 속도 상수의 역수이다.

[0018] 상기 특정 기체는 단일항 산소이다.

[0019] 특정 기체 및 특정 기체와 반응하는 물질의 화학 반응은 특정 기체의 농도와 특정 기체와 반응하는 물질의 농도의 곱에 비례하는 이차 반응이다.

[0020] 화학 반응이 진행될수록 특정 기체와 반응하는 물질의 농도는 시간에 따라 감소한다.

발명의 효과

[0022] 본 발명에 따르면, 일상적인 대기 환경 하에서 측정하고자 하는 특정 기체의 수명 및 확산 거리를 알아낼 수 있으며, 이를 기초로 실제 제품 등에 적용시 어떻게 적용을 할지 미리 예측이 가능하므로 매우 유용하게 활용이 가능할 것이다.

[0023] 특히 단일항 산소와 같은 유해한 기체에 대해서 생존 시간 및 확산 거리를 예측함으로써 더욱 효율적인 활용이 가능하게 된다.

도면의 간단한 설명

[0025] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 기체 발생 장치 및 반응 물질부의 개략도이다.

도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 방법의 순서

도를 도시한다.

도 3은 특정 기체와 반응하고 남은 검출 물질의 농도를 거리를 변경하면서 시간에 따라 측정한 데이터를 도시한다.

도 4는 일상 대기 환경 하에서 단일항 산소의 수명과 확산 거리를 알아내는 실험 장치를 도시한다.

도 5는 도 4의 장치를 사용하여 얻어낸 실험 결과(symbol)와 이론을 나타내는 그래프이다.

다양한 실시예들이 이제 도면을 참조하여 설명되며, 전체 도면에서 걸쳐 유사한 도면번호는 유사한 엘리먼트를 나타내기 위해서 사용된다. 설명을 위해 본 명세서에서, 다양한 설명들이 본 발명의 이해를 제공하기 위해서 제시된다. 그러나 이러한 실시예들은 이러한 특정 설명 없이도 실행될 수 있음이 명백하다. 다른 예들에서, 공지된 구조 및 장치들은 실시예들의 설명을 용이하게 하기 위해서 블록 다이어그램 형태로 제시된다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0026] 이하, 첨부한 도면을 참조하여 본 발명의 실시예에 대해 상세히 설명한다. 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 각 도면을 설명하면서 유사한 참조부호를 유사한 구성요소에 대해 사용하였다.
- [0027] 본 출원에서 사용한 용어는 단지 특정한 실시 예를 설명하기 위해 사용된 것으로서 본 발명을 한정하려는 의도가 아니다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 출원에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.
- [0028] 본 발명은 대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 내용에 관한 것이다.
- [0029] 이러한 방법을 이용함으로써 독성이 있을 수 있는 기체에 대해 무해화 시간 및 확산 거리를 미리 예측하고 측정함으로써 실제 제품에 이용시 더욱 안전하게 이용을 할 수 있게 된다.
- [0030] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 기체 발생 장치 및 반응 물질부의 개략도이고, 도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 방법의 순서도를 도시한다.
- [0031] 본 발명의 일 실시예에 따른 대기 환경 하에서 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 측정하는 방법은, 1) 일면에 특정 기체를 발생시키는 기체 발생 장치를 배치하고, 상기 일면과 대향하는 타면에 상기 특정 기체와 반응하는 물질을 포함한 반응 물질부를 배치하는 단계(S 210); 2) 상기 기체 발생 장치 및 상기 반응 물질부 사이의 거리를 변경시키면서 발생된 기체와 반응하는 물질이 반응하지 않고 남아 있는 농도를 시간에 따라 측정하여 데이터를 얻는 단계(S 220); 3) 하기 수학적 (1) 및 (2)와 같은 수학적식을 준비하는 단계(S 230); 4) 상기 수학적 (1) 및 상기 수학적 (2)를 풀어서 $C(L,t)$ 가 측정 시간(t) 및 발생 평면 위치(L)에 의존하는 결과를 얻는 단계(S 240); 5) 4) 단계에서 얻어진 결과가 2) 단계에서 얻어진 데이터에 맞도록 비선형 함수 최적화 과정을 통해 γ 및 τ 를 결정하는 단계(S 250); 및 6) 5) 단계에서 얻어진 γ 의 역수를 구하여 특정 기체의 생존 시간(t) 및 확산거리($\sqrt{2D\gamma^{-1}}$)를 구하는 단계(S 260)를 포함한다.
- [0032] 도 1과 같이 일상적인 대기 환경 하에서 독성 기체 또는 일반 기체와 같은 특정 기체의 생존 시간 및 확산 거리를 구하기 위해 장치를 준비한다. 먼저, 한 쪽 면에는 특정 기체를 발생시키는 장치(도 1에선 왼쪽 면)가 있고, 다른 쪽 끝(도 1에서 오른쪽 면)에는 특정 기체와 반응하는 물질을 설치해 두었다. 이렇게 발생된 기체는 공기 중에서 다른 공기 분자들과의 충돌 등으로 인해 다른 분자로 전환되기도 하고, 일부는 끝까지 살아남아 특정 기체와 반응하는 물질과 반응을 일으키기도 한다. 여기서 알고 싶은 특정 기체의 수명 및 확산 거리를 알아보기 위해 특정 기체를 발생시키는 장비와 이와 반응하는 물질 사이의 거리를 조금씩 바꿔가면서 각 경우 특정 기체와 반응하는 물질이 반응하지 않고 남아있는 농도가 시간에 따라 어떻게 변화 하는지를 정량적으로 측정하였다(도 3 참고). 이 실험결과로부터 특정 기체의 생존시간을 얻어내기 위해서 이론적 모델과 수학적 분석 방법을 개발하였다. 도 3은 특정 기체와 반응하고 남은 검출 물질의 농도를 거리를 변경하면서 시간에 따라 측정한 데이터를 도시한다.
- [0033] S 210 단계는 1) 단계로서 일면에 특정 기체를 발생시키는 기체 발생 장치를 배치하고, 상기 일면과 대향하는

타면에 상기 특정 기체와 반응하는 물질을 포함한 반응 물질부를 배치한다. 이는 도 1에서 이미 설명한 부분에 해당한다.

[0034] S 220 단계는 2) 단계로 상기 기체 발생 장치 및 상기 반응 물질부 사이의 거리를 변경시키면서 발생된 기체와 반응하는 물질이 반응하지 않고 남아 있는 농도를 시간에 따라 측정하여 데이터를 얻는 과정을 수행한다. 도 1과 함께 설명한 것처럼 기체 발생 장치 및 반응 물질부 사이의 거리를 변경시키면서 발생된 기체와 반응하는 물질이 반응하지 않고 남아 있는 농도를 시간에 따라 측정하여 데이터를 얻으며, 그 결과가 도 3과 같은 그래프로 나타나게 된다.

[0035] S 230 단계는 3) 단계로 하기와 같은 수학식 (1) 및 (2)를 준비한다. 이러한 수학식은 특정 기체가 기체 발생 장치로부터 발생되서 특정 기체와 반응하는 물질을 포함한 반응 물질부로 퍼져 나가고 그 과정에서 공기 중에서 소멸되고 반응 평면에서 반응하여 소멸되는 모델로부터 도출되며, 이 경우 특정 기체의 농도는 발생 평면에서 떨어진 위치(x)와 시간(t)에 따라 변화하기 때문에 $R(x,t)$ 로 표시되고 수학식 (1)과 같이 이론적 모델에 근거하여 도출될 수 있다. 또한, 반응 물질부에서 특정 기체와 반응하고 남은 반응 물질의 농도는 $C(L,t)$ 로 표시될 수 있고 이는 수학식 (2)와 같은 화학반응 속도식을 만족하게 된다.

$$\frac{\partial}{\partial t} R(x,t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} R(x,t) - \gamma R(x,t) + \delta(x) P_0 - \kappa \delta(x-L) C(L,t) R(L,t) \quad (1)$$

$$\frac{dC(L,t)}{dt} = -\kappa C(L,t) R(L,t) \quad (2)$$

[0038] 이 경우 D는 기체의 공기중 확산 계수, γ 는 기체가 공기 중에서 바닥상태로 전이되는 과정의 일차속도상수, P_0 는 기체가 발생평면에서 단위면적당 생성되는 속도 혹은 유량(flux)이며, κ 는 기체가 반응평면에서 반응물질과 일으키는 산화반응의 이분자반응 속도계수를 나타낸다. $\delta(x)$ 는 디랙 델타 함수(Dirac delta function)을 의미한다.

[0039] S 240 단계는 4) 단계로서 3) 단계의 수학식 (1) 및 수학식 (2)를 풀어서 $C(L,t)$ 가 측정 시간(t) 및 발생 평면 위치(L)에 의존하는 결과를 얻는 단계이다. 위 두 방정식을 풀어 실험관찰량인 반응평면에 남아있는 반응물질의 농도 $C(L,t)$ 가 측정 시간과 및 발생 평면 위치 L에 따라 변화하는 양상을 얻어낼 수 있다. $C(L,t)$ 은 발생 평면에서의 특정 기체의 생성 유량(P_0), 공기중에서 일어나는 특정 기체 일차소멸반응의 속도상수(γ), 그리고 반응평면에서 일어나는 이차반응속도 계수(κ)에 모두 의존한다. 이 중 P_0 의 값은 실험적으로 직접 측정이 가능하다.

[0040] S 250 단계는 5) 단계로서, 4) 단계에서 얻어진 결과가 2) 단계에서 얻어진 데이터에 맞도록 비선형 함수 최적화 과정을 통해 γ 및 τ 를 결정하는 단계이다. γ 및 τ 값은 실험 결과를 이론에서 얻어진 $C(L,t)$ 의 결과와 비교하여 얻어낼 수 있는 값이다. 구체적으로 도 3의 결과와 위의 식 (1) 및 (2)를 풀어서 얻어진 결과에 기초하여 이를 비교함으로써 γ 및 τ 값의 최적값을 비선형 함수 최적화 과정을 통해 결정한다. 식(1) 및 식(2)를 풀면 $C(L,t)$ 의 결과를 얻어보면 시간에 대해 비선형 곡선이 얻어지고, 이 비선형 곡선의 모양은 실험으로 직접 측정이 어려운 γ 및 τ 에 따라 달라지게 된다.

[0041] S 260 단계는 6) 단계로서, 5) 단계에서 얻어진 γ 의 역수를 구하여 특정 기체의 생존 시간(t) 및 확산거리($\sqrt{2D\gamma^{-1}}$)를 구하는 단계이다. 이를 통해 최종적으로 생존 시간 및 확산 거리를 구할 수 있게 된다. 공기 중 특정 기체의 평균 생존시간은 특정 기체가 바닥상태 산소로의 전환 속도 상수의 역수이므로 시간(t)을 구할 수 있다.

[0042] 특정 기체 및 특정 기체와 반응하는 물질의 화학 반응은 특정 기체의 농도와 특정 기체와 반응하는 물질의 농도의 곱에 비례하는 이차 반응이고, 화학 반응이 진행될수록 특정 기체와 반응하는 물질의 농도는 시간에 따라 감소한다.

[0043] 이하에서는 구체적인 실시예와 함께 본 발명의 내용을 추가적으로 설명하도록 하겠다.

실시예 1

[0045] 일상적 대기 환경 하에서 기체 상태 단일항 산소의 수명 및 확산 거리를 정확히 알기 위해 다음과 같은 방법을 사용하였다. 먼저, 한 쪽 면에는 기체 상태의 단일항 산소를 발생시키는 장치가 있고, 다른 쪽 끝에는 기체 상태의 단일항 산소와 반응하는 물질을 설치해 두었다 (도 4 참고). 이렇게 발생된 기체 상태의 단일항 산소는 공기 중에서 다른 공기 분자들과의 충돌 등으로 인해 산소 분자로 전환되기도 하고, 일부는 끝까지 살아남아 단일

항 산소와 반응하는 물질과 반응을 일으키기도 한다. 여기서 단일항 산소의 수명 및 확산 거리를 알아보기 위해 단일항 산소를 발생시키는 장비와 단일항 산소와 반응하는 물질 사이의 거리를 조금씩 바꿔가면서 각 경우 단일항 산소와 반응하는 물질이 반응하지 않고 남아있는 농도가 시간에 따라 어떻게 변화 하는지를 정량적으로 측정 하였다 (실험결과를 보여주는 도면 5 참고). 이 실험결과로부터 단일항 산소의 생존시간을 얻어내기 위해서 다음과 같은 이론적 모델과 수학적 분석 방법을 개발하였다.

[0047] 단일항 산소의 발생과 확산:

[0048] 단일항 산소는 한 평면에서 발생된다. 단일항 산소는 이 발생 평면으로부터 일정한 속도로 지속적으로 생성되어 확산을 통해 공기 중으로 퍼져 나간다.

[0050] 공기 중 단일항 산소 소멸:

[0051] 단일항 산소가 확산을 하는 동안 일정한 속도 상수를 가지는 일차반응을 거쳐 바닥 상태 산소로 전환된다. 이 바닥상태 산소로의 전환은 대부분 대기를 구성하는 공기 분자들과의 충돌로 이루어지나 다른 원인들도 있는데, 본 모델에서 사용하는 바닥상태 산소로의 전환 속도 상수는 단일항 산소가 바닥상태 산소로 전환되는 모든 메커니즘 및 과정들의 속도를 총괄적으로 고려하는 것이다. 공기 중 단일항 산소의 평균 생존시간은 단일항 산소가 바닥상태 산소로의 전환 속도 상수의 역수와 같다.

[0053] 반응평면에서 단일항 산소 소멸:

[0054] 생성된 단일항 산소 가운데 일부는 공기중에서 소멸되지 않고 살아남아 시스템 다른 쪽 끝에 위치한 반응 평면에 단일항 산소와만 반응하는 물질과 화학반응을 일으킨다. 이 화학반응은 그 속도가 단일항 산소의 농도와 단일항 산소와 반응하는 분자의 농도의 곱에 비례하는 이차 반응이다. 이 반응이 일어나는 정도에 따라 단일항 산소와 반응하는 물질의 농도는 시간에 따라 감소하게 된다.

[0056] 실험 관찰량:

[0057] 반응 평면에서 단일항 산소와 반응하지 않고 남아 있는 반응물의 농도.

[0059] 수학적 분석방법

[0060] 단일항 산소의 농도는 발생 평면에서 떨어진 위치, x 와 시간, t 에 따라 변화하기 때문에 $R(x,t)$ 로 표현한다. 발생평면은 $x=0$ 에 위치하고 있고 반응 평면은 $x=L$ 에 위치하고 있다. 반응 평면에 단일항 산소와 반응하지 않고 남아 있는 반응물의 농도는 $C(L,t)$ 라고 할 때 위에 기술한 이론적 모델의 단일항 산소 농도와 실험관찰량이 만족하는 수학적 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t} R(x,t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} R(x,t) - \gamma R(x,t) + \delta(x) P_0 - \kappa \delta(x-L) C(L,t) R(L,t) \quad (1)$$

[0062] 우변의 D 는 단일항 산소의 공기중 확산 계수, γ 는 단일항 산소가 공기 중에서 바닥상태로 전이되는 과정의 일차속도상수, P_0 는 단일항 산소가 발생평면에서 단위면적당 생성되는 속도 혹은 유량(flux)이며, κ 는 단일항 산소가 반응평면에서 반응물질과 일으키는 산화반응의 이분자반응 속도계수이다. 반응평면에 남아있는 단일항 산소와 반응할 수 있는 물질의 농도인 $C(L,t)$ 는 다음 화학반응속도식을 만족한다.

$$\frac{dC(L,t)}{dt} = -\kappa C(L,t) R(L,t) \quad (2)$$

[0064] 위 두 방정식을 풀어 실험관찰량인 반응평면에 남아있는 반응물질의 농도 $C(L,t)$ 가 측정 시간과 및 발생 평면 위치 L 에 따라 변화하는 양상을 얻어낼 수 있다. $C(L,t)$ 은 발생 평면에서의 단일항 산소의 생성 유량, P_0 , 공기중에서 일어나는 단일항 산소 일차소멸반응의 속도상수, γ , 그리고 반응평면에서 일어나는 이차반응속도 계수, κ 에 모두 의존한다. 이 중 P_0 의 값은 실험적으로 직접 측정이 가능하고, γ 및 τ 값은 실험 결과를 이론에서 얻어진 $C(L,t)$ 의 결과와 비교하여 얻어낼 수 있다.

[0065] 위의 식 (1) 및 (2)를 초기 및 바운더리 조건 하에서 풀면, 아래와 같은 식 (3) 및 (4)를 얻을 수 있다. 이 경우 $C(L,t)/C(L,0) (=C(t)/C_0)$ 이다.

$$\frac{C(t)}{C_0} = \exp \left[-\kappa \int_0^t d\tau R(L,\tau) \right]. \quad (3)$$

[0067] 여기서 $x=L$ 에서 단일항 산소 농도 $R(L,t)$ 는 아래와 같은 식(4)의 인버스-라플라스 변환에 의해 주어진다.

[0068]
$$\hat{R}(L,s) = \frac{1}{s} \frac{P_0 \operatorname{csch}(z'L)}{Dz' + C_0 \kappa \coth(z'L)} \quad (4)$$

[0069] 여기서 s 는 라플라스 변수이고, $z' = \sqrt{(s+\gamma)/D}$ 이다. 식 (3) 및 (4)의 자세한 detailed derivation은 ESI에서 주어지며, small L limit에서 식 (3) 및 (4)는 아래와 같은 결과를 도출한다.

[0070]
$$\lim_{L \rightarrow 0} \frac{C(t)}{C_0} = \exp[-(P_0/C_0)t]. \quad (5)$$

[0071] 식(5)를 $L=0$ 에서 얻어진 실험적 데이터와 비교함에 의해 P_0/C_0 가 $3.99 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}$ 의 값으로 도출된다.

[0072] 공기중 단일항 산소의 생존시간은 이렇게 얻어진 γ 의 역수, 즉, γ^{-1} 값으로부터 알아낼 수 있다. 공기 중에서 단일항 산소의 평균 제곱 변위와 확산 계수와의 관계식인 $\overline{\Delta x^2(t)} = 2Dt$ 를 활용하여 단일항 산소가 공기 중에서 발생 후 소멸 되기 전까지 평균 확산 거리를 $\sqrt{2D\gamma^{-1}}$ 로 구할 수 있다.

[0073] 도 4에 표시된 실험 장치에서 단일항 산소 발생은 TDCPP로 표시된 평면에 녹색 LED를 비추는 순간부터 일어난다. 그리고 단일항 산소와 반응하여 산화되는 물질이 있는 반응 평면은 DPBF로 표시된 평면이다. 마이크로 스테이지를 사용하여 이 반응평면이 단일항 산소 발생평면으로부터의 거리, L ,를 정확하게 조절한 후 단일항 산소를 일정 유량으로 발생시키면서 시간에 따라 변화하는 반응평면의 반응물질농도의 시간에 따른 변화를 측정한다. L 을 변화시켜가며 이 실험을 반복한다. 이 실험을 통해 다양한 L 값에 대해 얻어진 실험 데이터를 도 5에 다른 기호들로 나타내었다.

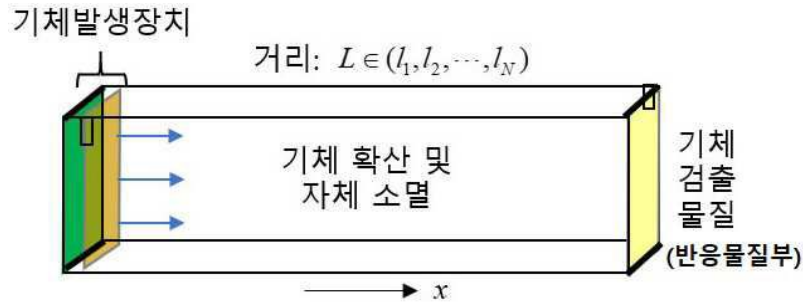
[0074] 본 발명을 통해 얻어진 모델과 이론으로 도 5에 얻어진 실험 데이터들을 정량적으로 설명할 수 있었다. P_0 값은 $L=0$ 인 경우, 즉 단일항 산소 발생평면과 반응평면이 접촉해 있는 실험결과로부터 직접 얻을 수 있다. 남은 조절 변수는 γ 및 τ , 두 개인 실험결과와 비교하여 값들을 최적화 하면 모든 L 값에 대해 모든 시간에서 얻어진 실험 결과를 정량적으로 설명할 수 있다. 이 정량적 분석을 통해 일상 대기 환경 하에서의 단일항 산소의 수명, γ^{-1} 은 2.80초이며, 확산 거리는 $\sqrt{2D\gamma^{-1}} = 0.992 \text{ cm}$ 로 알아낼 수 있었다.

[0075] 이 발명을 통해 일상적인 대기압 및 상온 하에서 기체 상태의 단일항 산소는 발생된 지 대략 3초가 지난 뒤, 혹은 단일항 산소 발생 지점에서 약 1 cm 떨어진 지점에서 인체에 무해한 산소 기체로 바뀔 수 있었다. 이는 다양한 산업적인 활용도가 있을 것으로 예상된다. 예를 들면, 빛을 받으면 기체 상태의 단일항 산소를 만들어내는 물질을 이용해서 자동으로 살균되는 장비를 손쉽게 만들 수 있는데 이때, 본 발명에서 제시한 수치를 근거로 하여 단일항 산소가 발생하는 지점으로부터 인체에 무해한 범위를 알 수 있게 되어 실제 이를 활용한 가전제품 등의 디자인을 할 때 중요한 정보가 될 수 있을 것으로 예상된다. 또한 단일항 산소의 살균 효과뿐만 아니라, 다른 성질을 사용해서 그에 맞는 물건을 만들거나 디자인을 할 때 해당 발명에서 제시된 수치가 유용하게 사용될 수 있을 것이다.

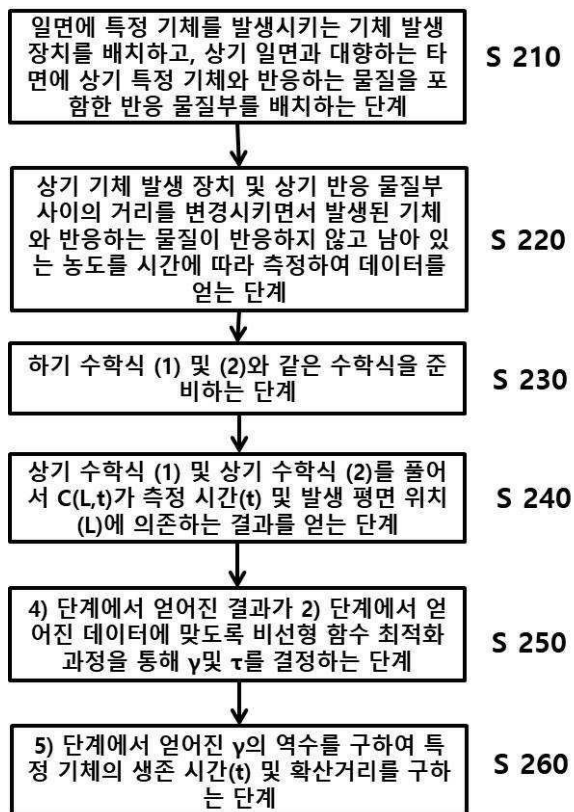
[0077] 상기에서는 본 발명의 바람직한 실시예를 참조하여 설명하였지만, 해당 기술분야의 숙련된 당업자는 하기의 특허 청구 범위에 기재된 본 발명의 사상 및 영역으로부터 벗어나지 않는 범위 내에서 본 발명을 다양하게 수정 및 변경시킬 수 있음을 이해할 수 있을 것이다.

도면

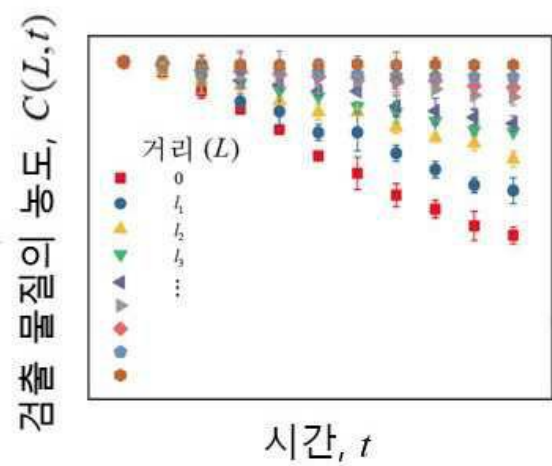
도면1



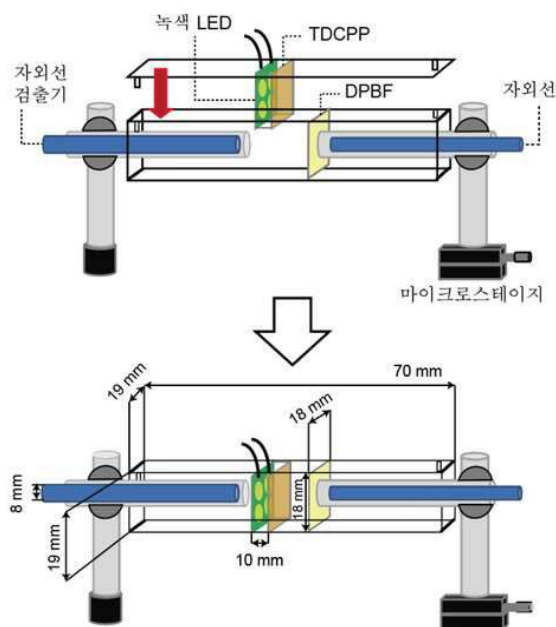
도면2



도면3



도면4



도면5

