

# 원자쌍 분포함수를 이용한 순수 C<sub>3</sub>S 경화체의 고온 노출 시 나노 구조에 관한 연구

## Analysis of Nano Structure of Pure C<sub>3</sub>S Paste Subjected to High Temperature using Atomic Pair Distribution Function

지 현 석*	서 형 원**	박 태 훈**	배 성 철***
Jee, Hyeonseok	Suh, Heongwon	Park, Taehoon	Bae, Sungchul

### Abstract

When the cement paste in concrete is exposed to high temperatures, the mechanical performance decreases due to a series of reactions inside the cement. In this study, we investigated the change of nanostructure of C<sub>3</sub>S when C<sub>3</sub>S was exposed to high temperature using pair distribution function (PDF) based on high energy X-ray scattering. As a result of X-ray diffraction, there was no significant difference when C<sub>3</sub>S was heated at 300°C, but most of Ca(OH)<sub>2</sub> was decomposed into CaO at 500°C. In addition, it was confirmed that CaO is dominant in the nanostructure when C<sub>3</sub>S is heated to 500° C.

키 워 드 : 고온, 나노 구조, 원자쌍 분포 함수  
Keywords : high temperature, nano structure, pair distribution function

## 1. 서 론

### 1.1 연구의 목적

콘크리트는 기본적으로 내화 재료로 인식되나, 콘크리트 내의 시멘트 페이스트가 고온에 노출되었을 시 시멘트 내부의 반응으로 인한 화학적, 역학적 성능의 저하가 일어나게 된다. 그 때문에 시멘트 페이스트가 고온에 노출되었을 시 시멘트 페이스트의 기계적·화학적 성질의 변화에 대한 연구가 많이 진행되어 왔다. 최근, 입자가속기 고에너지 X-선을 이용한 분석 기술들이 시멘트계 재료의 나노 구조 이해에 큰 도움을 주고 있다. 이에 본 연구에서는 고에너지 X-선 산란을 이용한 원자쌍 분포함수 (pair distribution function, PDF)를 통하여 시멘트 클링커 (C<sub>3</sub>S)가 고온에 노출되었을 시 나노 구조 변화에 대하여 연구하였다.

## 2. 실험 방법 및 재료

### 2.1 실험 재료

실험에 사용된 재료는 triclinic C<sub>3</sub>S를 사용하였으며, 물-시멘트비는 0.5로 설정하였다, 시험체는 5 × 5 × 10 mm<sup>3</sup>로 제작되었다. 만들어진 시험체는 20, 300, 500°C로 가열하였다.

### 2.2 고 에너지 X-선 산란 실험

만들어진 시험체는 입자 가속기 시설 SPring8(Japan)의 Beamline BL22XU(λ =0.177820Å)를 통하여 X-선 산란 실험이 진행되었다. 실험이 진행되는 동안 압축 하중이 가해졌으며, 얻어진 X-선 산란 데이터를 식 (1)을 이용하여 PDF로 변환하였다.

$$G(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty Q[S(Q) - 1] \sin(Qr) dQ \quad \begin{matrix} Q: \text{역격자 벡터, } r: \text{원자간 거리,} \\ S(Q): \text{구조 인자, } G(r): \text{원자쌍 분포 함수} \end{matrix} \quad (1)$$

## 3. 결과 및 고찰

C<sub>3</sub>S의 고온 노출 시 X-선 회절 실험 결과가 그림 1 (a)에 나타나있다. 그 결과, C<sub>3</sub>S를 300°C 가열하였을 때는 큰 차이가 없으나, 500°C

\* 한양대학교 건축공학과 석사과정  
 \*\* 한양대학교 건축공학과 석박통합과정  
 \*\*\* 한양대학교 건축공학과 교수, 교신저자(sbae@hanyang.ac.kr)

가열 시 대부분의  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 가 분해되고 Lime이 생성된 것을 확인하였다. 기존 연구 결과,  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 는 400~500°C 사이에서 대부분 분해되었으며, 생성된  $\text{CaO}$ 는 일부 amorphous phase로 존재하였다. 이를 조금 더 자세히 분석하기 위한  $\text{C}_3\text{S}$ 의 고온 노출 시 PDF 해석 결과가 그림 1 (b), (c)에 나타나 있다. PDF결과에도  $\text{C}_3\text{S}$ 를 500°C 가열하였을 시 급격한 변화가 나타났다. 그림 1 (c)에서, 1.6 Å의 Si-O peak과 ~2.4 Å의 Ca-O peak의 강도는 가열 온도에 관계없이 크게 차이가 나지 않았다. 이는 amorphous C-S-H phase가 500°C까지는 분해가 되지 않았기 때문이라고 판단된다. 하지만 3.8 Å에 위치하는 Ca-Ca peak의 위치와 이 이후의 peak이 크게 변한 것을 확인하였다. 비교적 높은 r 구간에 지배적인 영향을 미치는  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 가 분해되었기 때문이라고 판단된다. 이를 확인하여 위하여  $\text{CaO}$ 의 PDF 결과를 PDFgui로 계산하여  $\text{C}_3\text{S}$ -500과 비교한 결과를 그림 1 (d)에 나타내었다. 그 결과,  $\text{C}_3\text{S}$ 를 500°C로 가열 시 나노 구조는  $\text{CaO}$ 가 지배적임을 확인하였다.

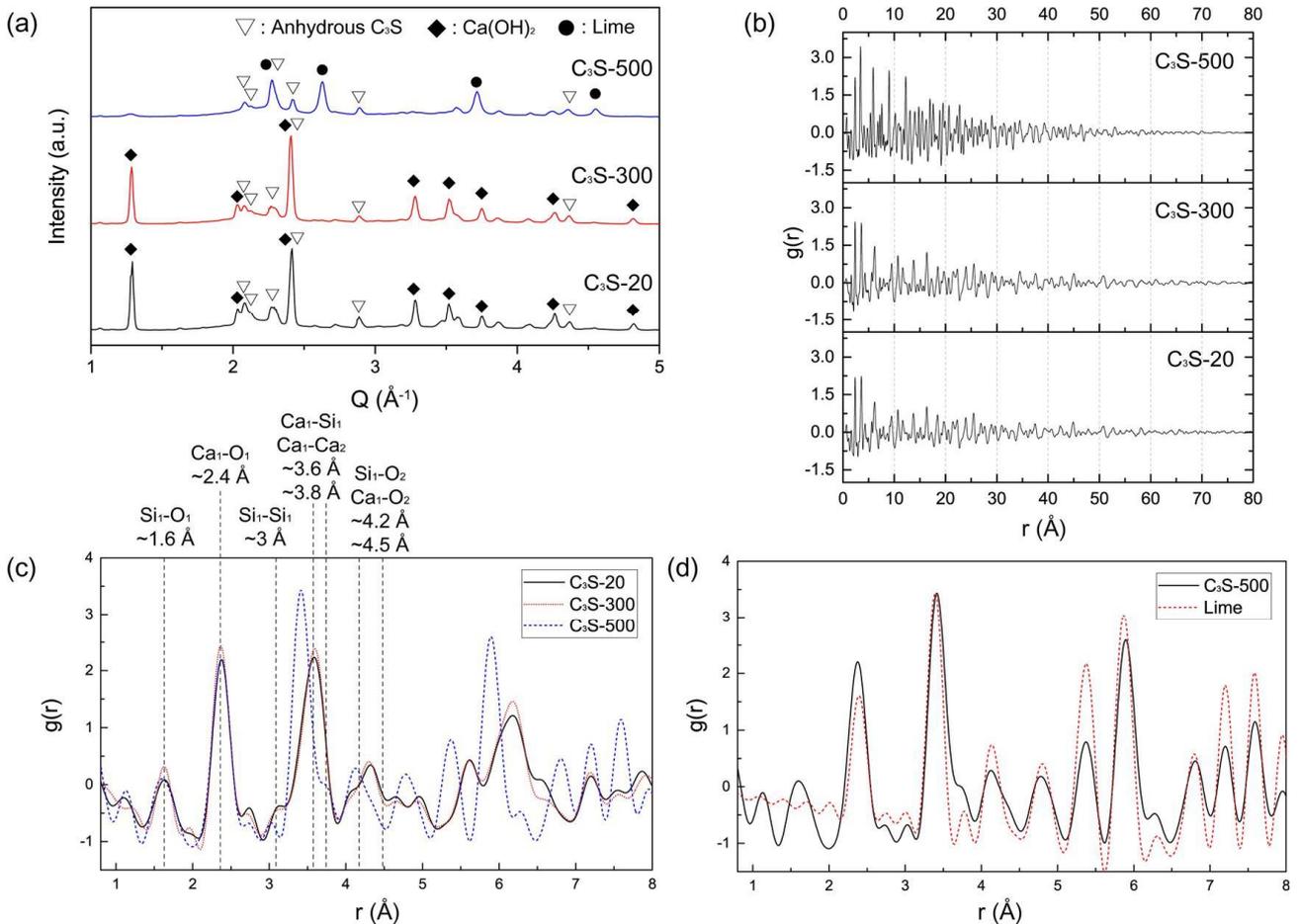


그림 1. (a)  $\text{C}_3\text{S}$ 의 가열 시 X선 회절 실험 결과, (b)  $\text{C}_3\text{S}$ 의 고온 노출 시의 PDF 해석 결과, (c)  $\text{C}_3\text{S}$ 의 고온 노출 시의 PDF 해석 결과 ( $r=1\text{-}8\text{\AA}$ ) (d)  $\text{C}_3\text{S}$  500°C 가열 샘플과 Lime ( $\text{CaO}$ )의 PDF 결과 비교

#### 4. 결 론

$\text{C}_3\text{S}$  페이스트의 고온 노출에 대한 나노 구조의 변화가 X-선 산란 실험 데이터를 통한 PDF 분석을 통하여 분석되었다. 그 결과,  $\text{C}_3\text{S}$ 를 300°C 가열하였을 시에는 나노 구조에 큰 변화가 나타나지 않았으나, 500°C 가열 시  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 가 분해되어 형성된  $\text{CaO}$ 가  $\text{C}_3\text{S}$ 의 나노 구조를 지배함을 확인하였다.

#### Acknowledgement

본 연구는 산업통상자원부(MOTIE)와 한국에너지기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구 과제입니다. (No. 20184030201970)

#### 참 고 문 헌

1. Zhang, Qi, and Guang Ye. Quantitative analysis of phase transition of heated Portland cement paste. Journal of thermal analysis and calorimetry 112,2 (2013): pp.629~636