

## XRD를 이용한 등방성 탄소섬유의 이산화탄소 활성화 과정 중 발생하는 구조변화 해석

### (Microstructural Evaluation of CO<sub>2</sub> Activation Process of Isotopic Carbon Fibers by XRD Analysis)

금오공과대학교 노재승

흑연(graphite), 석탄(coal), 숯(char), soot(검댕이) 등의 탄소로 이루어진 재료들은 비정질부터 완전한 흑연결정까지 다양한 구조를 나타낸다. 이러한 탄소재료의 구조의 출발물질 뿐 아니라 열처리에 따라 강한 영향을 받는다. 이러한 구조는 여러 구조인자에 의해 특성화되는데, 구조인자로는 층간거리  $d$ , 결정립 크기  $L_c$  그리고 결정립 직경  $L_a$ 이다. 이런 구조 인자의 지식은 흑연화, 탄소화, 가스화 등과 같은 다양한 공정을 이해하는데 매우 중요하다. 많은 연구자들은 XRD, Raman 분광, 고분해능 TEM 등과 같은 여러 기술을 통하여 이러한 구조인자에 대한 해석을 시도하였다. 그 중 XRD는 정량적 분석에 있어서 가장 많이 이용되는 기술이다. XRD 회절피크의 위치로부터 층간거리  $d$ 를 구할 수 있으며, 결정립 크기  $L_c$  및 결정립 직경  $L_a$ 는 피크의 line 퍼짐(반가폭)으로 직접 구할 수 있다. 한편 섬유상 흡착제로 이용되는 등방성 탄소섬유는 이산화탄소 또는 수증기에 의해 쉽게 활성화되어 최고 약 2,500 m<sup>2</sup>/g의 고 비 표면적을 얻을 수 있다. 이렇게 활성화 후 고 비표면적을 나타내는 이유는 좁은 분포를 나타내는 미세기공의 기공구조 때문에 발생하는 것으로 알려져 있다.

이 연구에서는 XRD를 이용하여 CO<sub>2</sub> 활성화 과정 중에 탄소섬유 내부에서 발생하는 미세구조 변화를 정량적으로 분석하고자 하였다. 등방성 피치계 탄소섬유를 CO<sub>2</sub> 중에서 기상산화 시켰으며, BET 측정장치를 이용하여 비 표면적 및 미세 기공분포를 측정하였고, 활성화된 각각의 섬유에 대하여 연속주사에 의한 XRD 회절피크를 얻었다. XRD 피크 위치로부터 층간거리  $d$ 를 구하였으며, Scherrer식을 이용하여 결정립 크기  $L_a$  및 결정립 직경  $L_c$ 를 구하였다.

XRD 분석결과 002 면의 층간거리는 burn-off가 증가할수록 증가하는 경향을 보였으며, 100면의 거리변화는 미약하였다. 또한 burn-off가 증가할 수록  $L_a$ 의 변화가  $L_c$  변화보다 크게 나타났다. 이 결과로부터 등방성 탄소섬유의 산화반응은 섬유 전체에서 균일하게 일어남을 알 수 있었으며, 002면의 면간 거리변화가 미세공 발달에 큰 기여를 하는 것으로 판단되었다.