

CNT 보강 시멘트 페이스트의 전기전도에 관한 침투임계점 예측

Prediction of Percolation Threshold for Electrical Conductivity of CNT-Reinforced Cement Paste

이선열¹ · 김동주^{2*}Seon Yeol Lee¹ · Dong Joo Kim^{2*}

(Received August 30, 2022 / Revised September 27, 2022 / Accepted September 27, 2022)

The percolation threshold of the CNT-reinforced cement paste is closely related to the optimal CNT amount to maximize the sensing ability of self-sensing concrete. However, the percolation threshold has various values depending on the cement, CNT, and water-to-cement ratio used. In this study, a percolation simulation model was proposed to predict the percolation threshold of the CNT-reinforced cement paste. The proposed model can simulate the percolation according to the amount of CNT using only the properties of CNT and cement, and for this, the concept of the number of aggregated CNT particles was used. The percolation simulation consists of forming a pre-hydrated cement paste model, random dispersion of CNTs, and percolation investigation. The simulation used CNT-reinforced cement paste with a water-cement ratio of 0.4 to 0.6, and the simulated percolation threshold point showed high accuracy with a simulation residual ratio of up to 7.5 % compared to the literature results.

키워드 : CNT, 시멘트 페이스트, 침투임계점, 시뮬레이션

Keywords : CNT, Cement paste, Percolation threshold, Simulation

1. 서론

탄소 나노튜브(CNT: carbon nanotube)는 우수한 기계적, 전기적 그리고 열적 특성을 갖는 나노 재료로 다양한 응용 분야에서 널리 사용되고 있다. 건설 분야에서는 CNT를 시멘트 복합재료 성능 개선을 위한 보강재로 활용하고자 하는 많은 연구가 수행되고 있다. 특히, 일부 연구자들은 CNT의 우수한 전기적 특성을 활용하여 콘크리트 구조물의 상태를 모니터링 할 수 있는 자기감지 콘크리트(self-sensing concrete)를 제안한바 있다(Lee et al, 2019).

자기감지 콘크리트는 CNT와 같은 높은 전기전도성 재료가 보강된 시멘트 복합재료로, 균열 또는 하중 상태를 전기저항 변화만으로 평가할 수 있는 모니터링 기술이다. CNT는 $10^6 \sim 10^7$ S/m의 높은 전기전도도를 갖는 나노 재료로 (Ramezani et al, 2022), 일반적으로 2 wt.% 이하의 적은 혼입량만으로 자기감지 콘크리트의

전기전도성 그리고 감지 성능을 향상시킬 수 있는 보강재로 보고되고 있다.

최근 자기감지 콘크리트의 감지 능력 극대화를 목적으로 CNT의 최적 혼입량 도출을 위한 다수의 연구가 진행되었다. Wen and Chung(2007)은 CNT의 침투 임계점(percolation threshold)에서 자기감지 능력이 극대화되며, 이는 대략 최적 혼입량을 나타낸다고 보고하였다. 침투 임계점은 전기 전도성 경로 또는 전기도도가 급격히 증가하는 CNT와 같은 전기전도성 재료의 혼입량을 말한다. 하지만 CNT의 침투 임계점은 자기감지 콘크리트에 사용된 CNT 그리고 시멘트의 재료 특성 그리고 물 시멘트 비 등에 따라 다양한 값을 나타낸다. 따라서 최적의 CNT 혼입량을 도출하기 위해서는 실험 기반의 다수의 시행착오가 불가피하다.

일부 연구자들은 CNT의 침투 임계점을 시뮬레이션 할 수 있는 모델을 제안하였다(Doh et al, 2021). 하지만, 기존 연구의 대부분

* Corresponding author E-mail: djkim75@sejong.ac.kr

¹세종대학교 건설환경공학과 철도인프라 연구소 박사과정 (Department of Civil and Environmental Engineering, Railway Infrastructure Research Center, Sejong University, 209, Neungdong-ro, Gwangjin-gu, Seoul 05006)

²세종대학교 건설환경공학과 철도인프라 연구소 교수 (Department of Civil and Environmental Engineering, Railway Infrastructure Research Center, Sejong University, 209, Neungdong-ro, Gwangjin-gu, Seoul 05006)

은 시멘트 복합재료가 아닌 에폭시 복합재료를 대상으로 한다. 현재까지 배합 초기 시멘트 입자 분포를 고려하여 CNT의 침투 임계를 시뮬레이션할 수 있는 모델은 제안된 바 없다. 이는 대표적으로 시멘트 입자와 CNT 사이 스케일 차이 때문으로 판단된다.

따라서, 이 연구에서는 CNT 보강 시멘트 페이스트의 전기전도에 관한 침투임계점을 예측할 수 있는 침투 시뮬레이션 모델을 제안하였다. 제안된 모델은 응집된 CNT 입자 수 개념을 기반으로 시멘트, CNT 그리고 배합 특성의 최소한의 정보만으로 CNT 혼입량에 따른 침투를 시뮬레이션 할 수 있도록 설계되었다. 시뮬레이션은 복셀(voxel) 기반의 3차원 격자 시스템 내 미수화된 CNT 보강 시멘트 페이스트 모델(pre-hydrated model)을 구현하고, CNT 간 접촉으로 발생하는 전도성 경로를 조사하는 과정을 포함한다. 최종적으로 제안된 모델은 기존 보고된 5가지 CNT 보강 시멘트 페이스트의 실험결과를 사용하여 검증되었다.

2. 시뮬레이션

제안된 침투 시뮬레이션 모델은 미수화된 CNT 보강 시멘트 페이스트에 대한 가상 모델을 구축하고, 모델 내 CNT 간의 접촉을 기반으로 전도성 경로, 즉 침투를 평가하는 방법을 따르며, 다음과 같은 3가지 과정을 포함한다: (1) voxel 기반의 미수화 시멘트 페이스트 모델 형성; (2) CNT 번들 랜덤 분산; 그리고 (3) 침투 조사. 시뮬레이션에 사용된 각각의 재료는 2.1장, 시뮬레이션 과정은 2.2, 2.3, 그리고 2.4장에서 상세히 설명된다.

2.1 시뮬레이션에 사용된 재료

침투 시뮬레이션은 서로 다른 물시멘트비, 시멘트, CNT, 그리고 CNT 분산 방법을 갖는 5가지 CNT 보강 시멘트 페이스트를 대상으로 수행되었으며, Table 1은 사용된 CNT 보강 시멘트 페이스트의 특성을 나타낸다. 여기서, 사용된 CNT 형상은 다음과 같

다:(1) 직경 12.5 nm, 길이 5.05 μm , 종횡비 404; (2) 직경 30 nm, 길이 10 μm , 종횡비 300; 그리고 (3) 직경 20 nm, 길이 10 μm , 종횡비 500. 또한, 사용된 Chinese Standard GB/T 175-2007에 따른 P.O. 42.5 시멘트의 입도분포 및 화학조성은 Wu et al.(2018), EN 197/1에 따른 CE I 52.5R 시멘트는 Šerelis et al.(2017)를 참고하였으며, 시멘트의 단위 중량은 3.2 g/cm^3 , CNT의 단위중량은 1.6 g/cm^3 을 사용하였다.

D'Alessandro et al.(2016) 그리고 Luo and Duan(2009)의 물시멘트비는 0.4로 동일한 P.O. 42.5의 시멘트가 사용되었으나, 사용된 CNT 종류 (종횡비 333, 404)와 CNT 분산 방법의 차이로 침투임계점(1.0, 2.0 wt.%)이 다른 특징을 갖는다. 마찬가지로, Luo et al.(2018) 그리고 Moral and Javier(2019)의 물시멘트비는 0.5로 동일하나, 사용된 CNT 종류(종횡비 333, 404), 시멘트 종류 (P.O. 42.5, CE I 52.5 R), 그리고 CNT 분산 방법의 차이로 침투임계점(1.4, 1.5 wt.%)이 다른 특징을 갖는다. 마지막으로 Coppola et al.(2011)는 0.6의 물시멘트비, CE I 52.5 R의 시멘트, 그리고 종횡비가 500인 MWCNT가 사용된 CNT 보강 시멘트 페이스트로, 이때 침투임계점은 1.0 wt.%으로 나타났다.

2.2 미수화 시멘트 페이스트 모델 형성

미수화 시멘트 페이스트 모델 형성 알고리즘은 시뮬레이션 공간이 되는 voxel 기반의 3차원 격자형 공간 내 미수화된 시멘트 페이스트 구현에 사용된다.

이 연구에서는 Nguyen et al.(2021)이 제안한 미수화 시멘트 페이스트 형성 알고리즘이 사용되었다. Nguyen et al.(2021)은 시멘트 수화 시뮬레이션을 목적으로, 단순화된 미수화 시멘트 페이스트 모델을 형성하기 위한 알고리즘을 제안하였다. 이는 기존 시멘트 페이스트 모델 형성 알고리즘과 달리, 시멘트 입도분포도 그리고 화학조성비만으로 실제와 유사한 수화 시뮬레이션 결과를 얻을 수 있는 시멘트 페이스트 모델 형성이 가능하다.

Table 1. Properties of CNT-reinforced cement pastes

Ref.	w/c	Pt (wt.%)	Properties of CNTs				Type of a cement	Dispersion method	
			Type	D (nm)	L (μm)	Aspect ratio		Magnetic stirring (min)	Sonication (min)
D'Alessandro	0.4	1.0	MWCNT	12.5	5.05	404	P.O. 42.5	10	30
Luo _a	0.4	2.0	MWCNT	30	10	333	P.O. 42.5	15	60
Luo _b	0.5	1.4*	MWCNT	30	10	333	P.O. 42.5	20	60
Moral	0.5	1.5	CNT	12.5	5.05	404	CE I 52.5R	(10*)	10
Coppola	0.6	1.0	MWCNT	20	10	500	CE I 52.5R	10	10

Pt = Percolation threshold, Luo_a = Luo and Duan(2009), Luo_b =Luo et al.(2018), * = volume ratio is 1.31 vol.%, ** = High shear mixer.

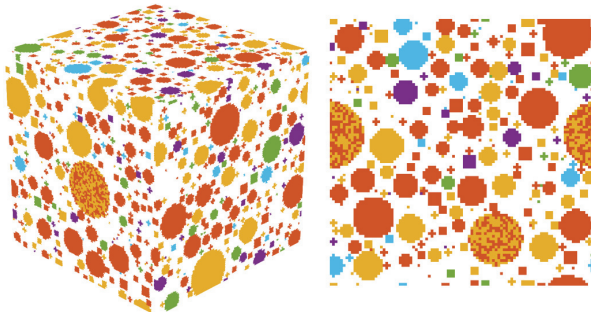


Fig. 1. Pre-hydrated model of cement paste

Nguyen et al.(2021)이 제안한 미수화 시멘트 페이스트 형성 알고리즘을 기반으로 형성된 시멘트 페이스트 모델은 Fig. 1과 같다: 물 시멘트 비 0.4; CEM I 42.5. Fig. 1에 제시된 모델의 크기는 $100 \cdot 100 \cdot 100$ voxel로, 각 voxel은 $1 \mu\text{m}^3$ 로 정의된다. 또한, 각각의 voxel은 하나의 상(phase)로 정의되며, white voxel은 물(water), red voxel은 규산삼석회(C_3S : tricalcium silicate), yellow voxel은 규산이석회(C_2S : dicalcium silicate), purple voxel은 알루미나삼석회(C_3A : tricalcium aluminate), green voxel은 철알루미나사석회(C_4AF : tetracalcium aluminoferrite), blue voxel은 집섬(gypsum)을 나타낸다.

제시된 시멘트 페이스트 모델의 간략화된 생성 과정은 다음과 같다: (1) 물로 정의되는 voxel 만으로 구성된 $100 \cdot 100 \cdot 100$ voxel 크기의 미세구조 생성; (2) 물시멘트비 그리고 시멘트의 입도분포도를 기반으로 배치가 필요한 구형 시멘트 입자 수 결정 및 랜덤 배치; (3) 화학 조성비를 기반으로 구형 시멘트 입자 내 C_3S , C_2S , C_3A , C_4AF , 그리고 gypsum를 랜덤 배치.

2.3 CNT 번들 랜덤 분산

CNT 번들 랜덤 분산 알고리즘은 CNT 보강 시멘트 페이스트 모델을 형성하기 위해, 2.2장에서 형성된 미수화 시멘트 페이스트 모델 내 CNT 번들을 분산시키는 과정을 포함한다.

이 연구에서는 Lee et al.(2022)가 제안한 CNT 번들 랜덤 분산 알고리즘이 활용되었다. Lee et al.(2022)는 CNT 보강 시멘트 페이스트에 대한 수화 시뮬레이션을 목적으로 CNT 보강 시멘트 페이스트 모델 형성 및 이를 기반으로 하는 수화 모델을 제안하였다. 하지만 해당 연구에서 제안된 CNT 랜덤 분산 알고리즘은 CNT 보강 시멘트 페이스트에 대해서 검증되지 않았으며, 모델 형성을 위해서는 분산된 CNT의 입도분포도 또는 CNT 번들 형상(직경, 길이, 그리고 중형비)의 사전 실험 결과가 필요한 한계점이 있다.

따라서 이 연구에서는 최소한의 CNT의 개별 형상(직경, 길이,

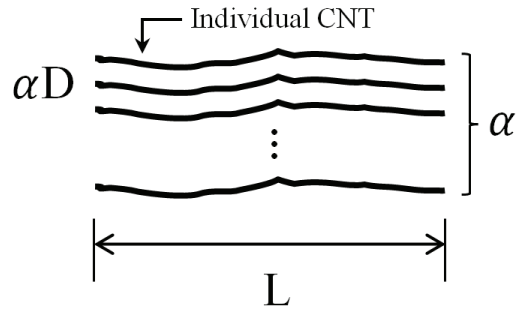


Fig. 2. Designed the shape of the CNT bundle

그리고 중형비)만으로 실제 실험 결과와 유사한 침투 임계점을 나타낼 수 있는 수정된 분산 알고리즘을 제안하였다. 이를 위해 CNT 입자 수 (α) 개념을 도입하였으며, Fig. 2는 이를 기반으로 분산되는 CNT 번들의 형상을 나타낸다. Fig. 2에서 α 는 응집된 CNT 수로 정의되며, 즉 α 가 3인 CNT 번들은 동일한 길이와 직경을 갖는 CNT가 3가닥 응집된 상태를 의미한다.

이 연구에서는 입력값 α 에 따라 배치될 CNT 번들의 형상을 결정하고, Lee et al.(2022)가 제안한 랜덤 분산 알고리즘을 활용하여 미수화 시멘트 페이스트 모델 내 분산시켰다. 랜덤 분산 과정은 Fig. 3과 같다. Fig. 3에서 각각의 CNT 번들은 초기 임의로 결정된 물 voxel의 좌표를 시작으로, $1 \mu\text{m}$ 간격으로 연속된 형태로 배치되며, 이때 $1 \mu\text{m}$ 의 CNT 번들은 Fig. 3과 같이 6방향 중 물로 정의된 voxel로 랜덤으로 결정된다. 이러한 과정은 CNT 번들 간의 응집 그리고 다양한 배치 형상을 고려하기 위해 사용되었다.

새롭게 제안된 CNT 번들 랜덤 배치 알고리즘으로 형성된 CNT 보강 시멘트 페이스트 모델은 Fig. 4와 같다: 시멘트 페이스트 모델

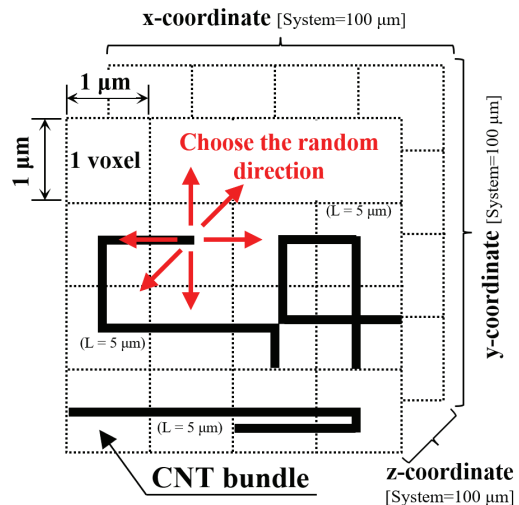


Fig. 3. Random dispersion process of CNT bundles

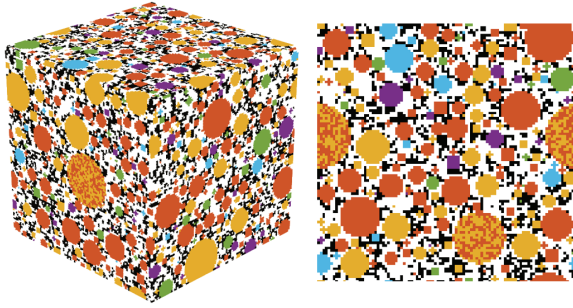


Fig. 4. Pre-hydrated model of CNT-reinforced cement paste

(Fig. 1), CNT 2 wt.% (직경 30 nm, 길이 10 μm), $\alpha = 9$. 여기서, black voxel은 CNT 번들을 일부 포함하고 있는 다상 복셀 (multiphase voxel)을 나타낸다. Multiphase voxel은 최소 해상도가 1 voxel/μm³ 인 마이크로 스케일의 격자 시스템 내 나노 소재의 CNT를 고려하기 위해 Lee et al.(2022)가 제안한 입자이다.

분산 과정에서 multiphase voxel 내 CNT 번들 혼입량 그리고 입자간 연결 정보는 분산 결과로 저장되며, 이는 침투 시뮬레이션 과정에서 전도성 경로, 즉 침투 조사에 사용된다.

2.4 침투 조사

침투 시뮬레이션 알고리즘은 CNT 번들 간 접촉으로 발생하는 전도성 경로를 조사하는 과정을 포함하며, 2.3장에서 형성된 CNT 보강 시멘트 페이스트 모델을 대상으로 한다.

이 연구에서 Lee et al.(2022)가 제안한 침투 시뮬레이션 알고리즘이 사용되었다. 이 알고리즘은 몬테카를로 시뮬레이션(Monte Carlo simulation)을 기반으로 하나, 격자형 시스템 및 multiphase voxel 맞춰 수정되었다. 몬테카를로 시뮬레이션은 특정 voxel 간 표면 접촉을 전도성 경로 형성으로 판단한다. 하지만, Lee et al.(2022)가 제안한 모델에서는 Fig. 5와 같이, 특정 voxel 내 CNT 번들이 중첩된 경우를 전도성 경로, 즉 침투가 발생한 것으로 판단한다: 빨간색 CNT 번들은 두 경계면 사이를 연결하는 전도성 경로가 형성된 경우, 검은색 CNT 번들은 전도성 경로가 형성되지 않은 경우를 나타낸다. 이는 CNT 번들이 하나의 voxel로 구성된 것이 아닌 multiphase voxel로 일부 공간만을 차지하고 있음을 고려하기 위함이다.

전도성 경로 조사에 따른 침투 임계점을 도출하기 위해 침투 이론(Percolation theory)이 사용되었다. 침투 이론에서 침투 임계점은 침투 확률(P, percolation probability)이 50 %에 도달하는 혼입량으로 정의한다. 침투 확률 P는 다음과 같이 계산된다.

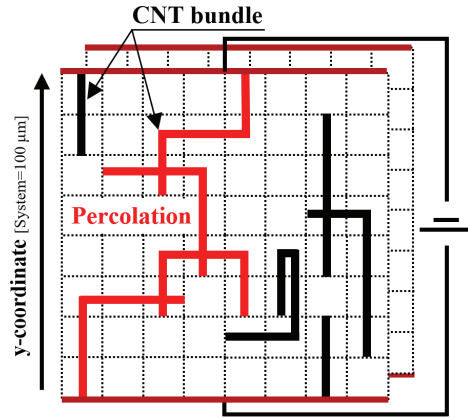


Fig. 5. Percolation process

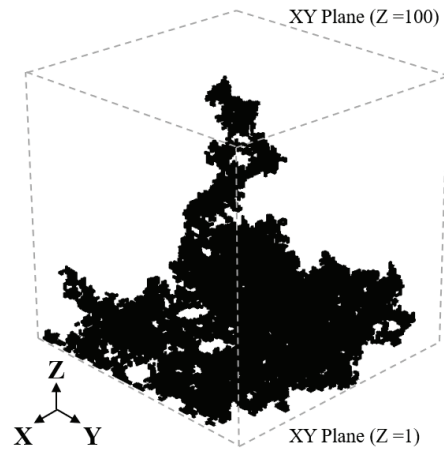


Fig. 6. Electrical path formed by the percolation of CNT bundles

$$P = 100 \cdot \frac{P_n}{T_n} \quad (1)$$

여기서, P는 침투 확률 (%), T_n 은 시뮬레이션 반복 횟수 그리고 P_n 은 시뮬레이션 중 침투가 발생한 누적 횟수로 정의된다.

이 연구에서는 시뮬레이션 반복 횟수 T_n 을 100회로 설정하였으며, 형성된 CNT 보강 시멘트 페이스트 모델(Fig. 4)을 대상으로 Fig. 6과 같이 두 XY 평면 (Z=1, 100) 사이를 연결하는 전도성 경로가 생성되었을 때 침투가 발생한 것으로 판단했다. CNT 혼입량에 따른 침투확률 그리고 침투 임계점을 도출하였다.

3. 시뮬레이션 결과

제안된 침투 시뮬레이션 모델을 사용한 5가지 CNT 보강 시멘트

Table 2. Percolation threshold according to α

Ref.	Simu. Pt (wt.%)				Exp. Pt (wt.%)
	$\alpha = 7$	$\alpha = 9$	$\alpha = 11$	$\alpha = 13$	
D'Alessandro	0.45	0.65	1.05	1.45	1.0
Luo _a	1.35	2.15	3.25	3.85	2.0
Luo _b	1.45	2.25	3.05	4.75	1.4
Moral	0.45	0.75	1.05	1.45	1.5
Coppola	0.65	1.05	1.55	2.15	1.0

* Luo_a = Luo and Duan(2009), Luo_b = Luo et al.(2018)

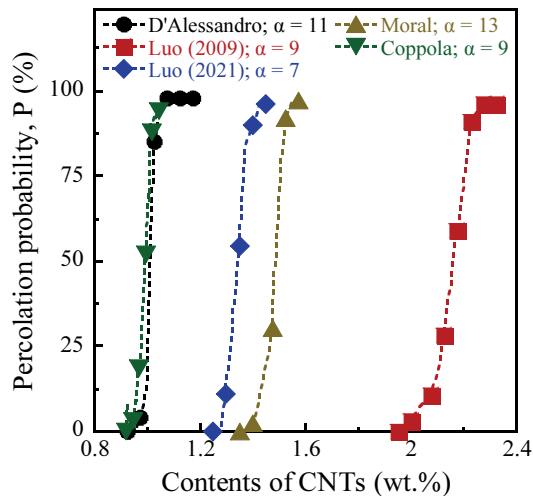


Fig. 7. Percolation probability according to contents of CNTs

페이스트(Table 1)의 시뮬레이션 결과를 Fig. 7 그리고 Table 2에 각각 제시하였다. Fig. 7은 실제와 가장 유사한 침투 임계점을 나타내는 α 를 기준으로, CNT 혼입량에 따른 침투 확률을 보여준다. Table 2는 α 에 따른 CNT 보강 시멘트 페이스트 모델의 시뮬레이션 된 침투 임계점 (Simu. Pt) 그리고 기존 문헌에서 제시한 침투 임계점 (Exp. Pt)을 요약적으로 보여준다.

Fig. 7에서 CNT 보강 시멘트 페이스트의 침투 확률은 CNT 혼입량 증가에 따라 급격한 증가를 보였다. 이때, 침투임계점은 D'Alessandro et al.(2016); Luo and Duan(2009); Luo et al.(2018); Moral and Javier(2019) 그리고 Coppola et al.(2011)이 각각 1.05 wt.% ($\alpha = 11$), 2.15 wt.% ($\alpha = 9$), 1.45 wt.% ($\alpha = 7$), 1.45 wt.% ($\alpha = 13$), 그리고 1.05 wt.% ($\alpha = 9$)로 나타났다.

시뮬레이션으로 도출된 침투 임계점과 기존 문헌에서 제시한 5가지 배합 별 잔차율(residual ratio)는 각각 5, 7.5, 3.6, 3.3, 그리고 5.0 %로, 최대 7.5 %의 잔차율로 높은 정확도를 보였다. 이때 시뮬레이션 잔차율은 다음과 같이 계산된다.

$$|Residual\ ratio| = 100 \cdot \left| \frac{Exp. Pt - Simu. Pt}{Exp. Pt} \right| \quad (2)$$

여기서, $|Residual\ ratio|$ 는 침투 임계점에 대한 실험 결과 대비 시뮬레이션 잔차율 (%), Exp. Pt는 침투 임계점에 대한 실험값, 그리고 Simu. Pt는 침투 임계점에 대한 시뮬레이션 값이다.

Table 2에서 α 가 증가함에 따라 침투 임계점이 증가하는 거동을 보였다. 이는 응집된 CNT가 많을수록, 즉 분산이 낮을수록 전기적 경로 형성에 필요한 혼입량이 증가한다는 것을 의미한다. 이때 실험과 유사한 시뮬레이션 결과를 보인 배합 별 α 는 각각 다른 결과를 보였다. 특히, 동일한 CNT가 사용된 Luo and Duan(2009) 그리고 Luo et al.(2018)의 α 는 각각 9, 7, 마찬가지로 D'Alessandro et al.(2016) 그리고 Moral and Javier(2019)의 α 는 각각 11, 13을 나타내었다. 이때 α 는 사용된 CNT의 형상 그리고 분산 조건과 밀접한 관련이 있는 것으로 나타났다.

4. 분석

이 연구에서는 5가지 CNT 보강 시멘트 페이스트 모델에 대해 실험과 유사한 침투 임계점을 나타내는 최적 α (Fig. 7)을 시뮬레이션으로 도출하였다. α 는 CNT의 형상 또는 분산 조건에 따라 다양한 값을 나타내었다. 하지만 제한된 침투 시뮬레이션 모델 확립을 위해서는 최적의 α 결정이 필요하다.

최적의 α 결정을 목적으로, (1) α 에 따른 침투 임계점에 대한 시뮬레이션과 기존 실험 결과 사이의 관계 분석 그리고 (2) CNT의 표면적(Sa: surface area)와 α 사이 관계를 집중적으로 분석하였다.

침투 임계점에 대한 시뮬레이션과 기존 실험 결과 사이의 관계는 Fig. 8과 같다. 여기서, 가로축 그리고 세로축은 각각 침투 임계점에 대한 실험값 그리고 시뮬레이션 값, 이때 구형, 사각형, 다이아몬드 기호는 각각 α 가 7, 9, 11에 해당하는 5가지 배합(Table 2)의 결과를 나타낸다. 또한, 점선은 α 에 따른 5가지 배합에 대한 선형 피팅 결과를 나타낸다. Fig. 8에 제시된 선형 피팅 결과에 따르면, α 가 7, 9, 그리고 11일 때 기울기는 각각 0.7272, 1.1911, 1.7602로 나타났으며, $\alpha = 9$ 에서 실험 결과와 시뮬레이션 결과 사이 가장 우수한 경향을 보였다. 따라서, $\alpha = 9$, 즉 일반적으로 분산된 CNT 번들은 9가닥의 CNT가 응집된 것으로 가정할 때, 실제와 유사한 결과를 보인다는 것을 의미한다. 하지만, 선형 피팅 결과에 대한 결정계수 (Fig. 8)는 $\alpha = 9$ 조건에서 0.4087로 낮은 경향을 나타내었다.

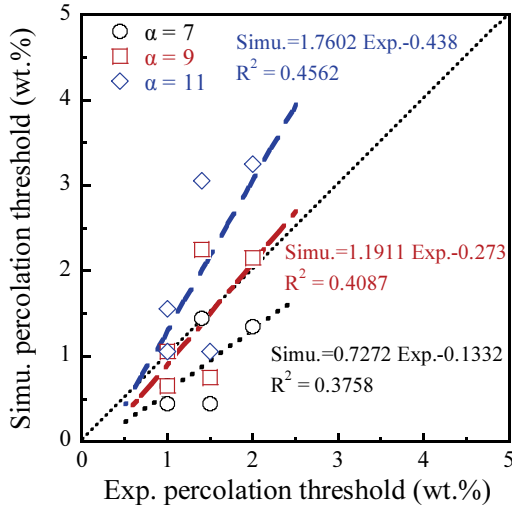


Fig. 8. Relationship between experiment and simulation results of percolation threshold according to α

CNT의 비표면적(S_a)과 α 사이 관계는 Fig. 9와 같다. 여기서 가로축과 세로축은 각각 배합 별로 CNT의 표면적 그리고 α 을 나타낸다. 이때 점선은 선형 피팅 결과로 다음과 같이 표현된다. 이 때, 분석에 사용된 CNT의 표면적(S_a)은 번들이 아닌 개별 CNT에 대한 값으로 기반으로 각각 계산되었다.

$$\alpha = 0.3466 \cdot S_a + 4.9991; R^2 = 0.8008 \quad (3)$$

$$S_a \left[\frac{m^2}{mg} \right] = \frac{0.25\pi D^2 + \pi DL}{10 \cdot (0.25\pi D^2 L) \cdot \gamma_{CNT}} \quad (4)$$

여기서, S_a 는 CNT의 비표면적(m^2/mg), D 는 CNT의 직경 (μm), L 은 CNT의 길이(μm), 그리고 γ_{CNT} 는 CNT의 단위중량 (g/cm^3)을 나타낸다.

Fig. 9에 제시된바 같이, CNT의 표면적과 α 는 밀접한 관련이 있는 것으로 조사되었다. 시뮬레이션에 사용된 CNT의 표면적이 높을수록 α 가 증가하는 경향을 보였다. 이는 CNT의 표면적이 높을수록 높은 반데르발스 힘 (Van der waals force)로 높은 응집을 갖는다는 문헌 결과와 일치한다(Ramezani et al, 2022).

또한, 동일한 CNT 보강 조건에서 발생한 α 의 차이는, α 가 CNT 분산과 밀접한 관련이 있음 시사한다. 동일한 CNT가 사용된 Luo and Duan(2009) 그리고 Luo et al.(2018) 모델의 α 는 각각 9, 7로, 물 시멘트 비와 교반기(magnetic stirring) 사용 시간이 상대적으로 높은 Luo et al.(2018)가 보다 낮은 $\alpha = 7$ 을 나타내었다. 마찬가지로 동일한 CNT가 사용된 D'Alessandro et al.(2016) 그리

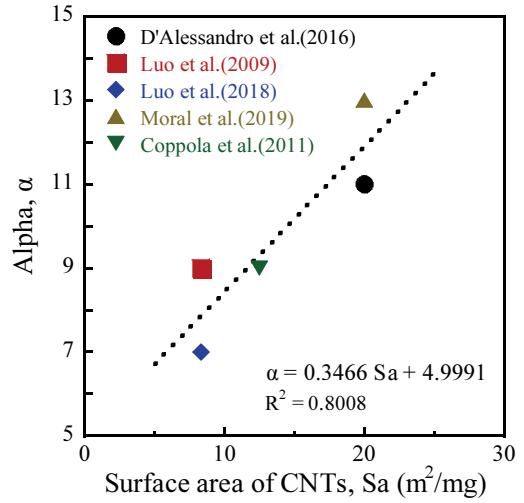


Fig. 9. Relationship between surface area of CNTs and α

고 Moral and Javier(2019) 모델의 α 는 각각 11, 13로, 물시멘트비와 초음파 분산(sonication) 시간이 상대적으로 높은 D'Alessandro et al.(2016) 모델이 낮은 $\alpha = 11$ 을 나타내었다. 이러한 차이는 식 (3)의 낮은 결정계수 ($R^2 = 0.8008$)의 원인으로 작용하며, 즉 제시된 모델에서 CNT 분산에 대한 영향을 고려하지 못해 발생한 것으로 볼 수 있다.

이와 같이, α 는 CNT 분산 조건과 밀접한 관련이 있을 것으로 판단된다. 하지만, 사용된 교반 및 초음파 분산의 시간, 용량, 파워, 속도 등에 따라 복합적인 영향을 받는 CNT 분산 특성 상, 이 연구에서 사용된 5가지 CNT 보강 시멘트 페이스트만 분산에 영향을 미치는 세부 요인을 고려하기에는 어려움이 있다. 따라서, 추가적인 조사 및 실험을 통해 추후 연구에서 CNT 분산 조건이 α 에 미치는 세부 영향을 조사하고자 한다.

하지만, 제안된 침투 시뮬레이션 모델은 이러한 한계점에도 불구하고 CNT 보강 시멘트 페이스트의 침투 임계점을 높은 정확도로 도출 할 수 있는 것으로 확인되었다.

5. 결론

이 연구에서는 CNT 보강 시멘트 페이스트에 대한 CNT의 침투 임계점을 도출할 수 있는 침투 시뮬레이션 모델을 제안하였다. 침투 시뮬레이션 모델을 개발하기 위해 지난 연구에서 제안된 (1) 미수화 시멘트 페이스트 모델 형성 알고리즘, (2) CNT 번들 분산 알고리즘, 그리고 (3) 침투 조사 알고리즘이 사용되었다. 특히, 이 연구에서는 분산된 CNT 물성이 필요한 기존 알고리즘과 달리, 응

집된 CNT 수 α 를 새롭게 적용하여 CNT에 대한 기본 물성만으로 침투 임계점을 시뮬레이션할 수 있도록 모델을 수정하였다. 제안된 모델 피팅 그리고 검증을 위해 수행된 5가지 CNT 보강 시멘트 페이스트에 대한 시뮬레이션 결론은 다음과 같다.

1. 제안된 침투 시뮬레이션 모델은 시멘트, CNT 그리고 기본 배합 물성의 최소한의 정보만으로 CNT 보강 시멘트 페이스트의 전기전도에 관한 침투임계점을 최대 7.5 % 잔차율로 예측 가능한 것으로 조사되었다.
2. 새롭게 제안된 응집된 CNT 수 α 를 CNT 번들 랜덤 분산 알고리즘과 연계하여, 최소한의 정보만으로 3차원 격자 시스템 내 구현된 시멘트 페이스트 모델 내 CNT 번들을 효과적으로 분산시킬 수 있는 것으로 조사되었다.
3. 일반적으로 물시멘트비가 0.4–0.6인 CNT 보강 시멘트 페이스트에 대한 침투 시뮬레이션 조건에서, 응집된 CNT 수 α 를 9로 가정하였을 때 실제 침투임계점 실험 결과와 가장 유사한 결과를 나타내었다.
4. CNT 보강 시멘트 페이스트별 실제 침투임계점과 가장 유사한 결과를 나타낸 최적의 응집된 CNT 수 α 와 이때 사용된 CNT의 개별 비표면적 사이 관계를 분석한 결과, 응집된 CNT 수 α 는 비표면적과 밀접한 관련이 있는 것으로 조사되었다. 이때 최적의 응집된 CNT 수 α 와 CNT의 비표면적(S_a : Surfaced area) 사이 관계는 다음과 같다.

$$\alpha = 0.3466 \cdot S_a + 4.9991; R^2 = 0.8008$$

Conflicts of interest

None.

감사의 글

본 연구는 국토교통부/국토교통과학기술진흥원의 지원으로 수행되었습니다(과제번호 22NANO-C156177-03).

References

- Coppola, L., Buoso, A., Corazza, F. (2011). Electrical properties of carbon nanotubes cement composites for monitoring stress conditions in concrete structures, *Applied Mechanics and Materials*, **82**, 118–123.
- D’Alessandro, A., Rallini, M., Ubertini, F., Materazzi, A.L., Kenny, J.M. (2016). Investigations on scalable fabrication procedures for self-sensing carbon nanotube cement–matrix composites for SHM applications, *Cement and Concrete Composites*, **65**, 200–213.
- Doh, J., Park, S.I., Yang, Q., Raghavan, N. (2021). Uncertainty quantification of percolating electrical conductance for wavy carbon nanotube-filled polymer nanocomposites using Bayesian inference, *Carbon*, **172**, 308–323.
- Lee, S.Y., Le, H.V., Kim, D.J. (2019). Self-stress sensing smart concrete containing fine steel slag aggregates and steel fibers under high compressive stress, *Construction and Building Materials*, **220**, 149–160.
- Lee, S.Y., Nguyen, V.T., Chung, S.Y., Moon, J.H., Kim, D.J. (2022). Hydration simulation of cement pastes reinforced with carbon nanotubes, *Construction and Building Materials*, Submitted.
- Luo, J.L., Duan, Z.D. (2009). The IV characteristics and percolation threshold of the cement-based materials filled with multi-walled carbon nanotubes, *Advanced Materials Research*, **60**, 36–39.
- Luo, J., Zhang, C., Duan, Z., Wang, B., Li, Q., Chung, K.L., Zhang, J., Chen, S. (2018). Influences of multi-walled carbon nanotube (MCNT) fraction, moisture, stress/strain level on the electrical properties of MCNT cement-based composites, *Sensors and Actuators A: Physical*, **280**, 413–421.
- Moral, D. Javier, F. (2019). Conductive concrete, nanoadditions and functional applications, In *CMMoST 2019: 5th International Conference on Mechanical Models in Structural Engineering*, 161–170.
- Nguyen, V.T., Lee, S.Y., Chung, S.Y., Moon, J.H., Kim, D.J. (2021). Effects of cement particle distribution on the hydration process of cement paste in three-dimensional computer simulation, *Construction and Building Materials*, **311**, 125322.
- Ramezani, M., Dehghani, A., Sherif, M.M. (2022). Carbon nanotube reinforced cementitious composites: a comprehensive review, *Construction and Building Materials*, **315**, 125100.
- Wen, S., Chung, D.D.L. (2007). Double percolation in the electrical conduction in carbon fiber reinforced cement-based materials, *Carbon*, **45(2)**, 263–267.
- Wu, P., Wang, C., Zhang, Y., Chen, L., Qian, W., Liu, Z., Jin, C., Z., Li, L. (2018). Properties of cementitious composites containing active/inter mineral admixtures, *Polish Journal of Environmental Studies*, **27(3)**, 1323–1330.

Šerelis, E., Vaitkevičius, V., Kerševičius, V. (2017), Research of UHPC properties prepared with industrial mixer, IOP

Conference Series: Materials Science and Engineering, **246(1)**, 012048.

CNT 보강 시멘트 페이스트의 전기전도에 관한 침투임계점 예측

CNT 보강 시멘트 페이스트의 침투 임계점은 자기감지 콘크리트의 감지 성능 극대화를 위한 최적 CNT 혼입량과 밀접한 관련이 있다. 하지만 침투임계점은 사용된 시멘트, CNT 그리고 물 시멘트 비에 따라 다양한 값을 가지며, 이를 얻기 위해서는 실험기반의 다수의 시행착오가 불가피하다. 이 연구는 CNT 보강 시멘트 페이스트의 침투 임계점 예측을 위한 침투 시뮬레이션 모델을 제안하였다. 제안된 모델은 CNT 그리고 시멘트 특성을 사용하여 CNT 혼입량에 따른 침투를 시뮬레이션할 수 있으며, 이를 위해 응집된 CNT 입자 수 개념이 사용되었다. 침투 시뮬레이션 과정은 미수화 시멘트 페이스트 모델 형성, CNT 랜덤 분산, 그리고 침투 조사의 순서로 구성된다. 시뮬레이션에는 물 시멘트 비가 0.4-0.6인 CNT 보강 시멘트 페이스트가 사용되었으며, 시뮬레이션 된 침투 임계점은 문헌 결과 대비 최대 7.5 %의 시뮬레이션 잔차율로 높은 정확도를 보였다.