

Problem 1.

$$w/c = \frac{V_w \cdot 1}{100 \cdot 3.14} \Rightarrow V_w = (w/c) \cdot (100) \cdot (3.14) \quad (\text{물의 부피})$$

위 식으로 각 값에 대해 다른 물의 부피 (V_w)를 구할 수 있으며, 물과 시멘트가 1:1의 부피비로 반응하므로, 100 cm^3 의 시멘트가 모두 반응한 후 남은 물의 양과 Porosity는 다음과 같다.

W/C.	0.3	0.4	0.5	0.6	(Unit = cm^3)
물 부피 (V_w)	94.2	125.6	157	188.4	
시멘트 부피 (V_c)	100	100	100	100	
(1) 수화반응 후 남은 물 부피	0	25.6	57	88.4	
(2) 잔여 부피	194.2	225.6	257	288.4	
∴ Porosity (= (1)/(2))	0%	11.35%	22.18%	30.65%	

Problem 2.

Cement A

$\text{SiO}_2 = 21.1\% \quad (S)$
 $\text{Al}_2\text{O}_3 = 4.2\% \quad (A)$
 $\text{Fe}_2\text{O}_3 = 4.9\% \quad (F)$
 $\text{CaO} = 65.0\% \quad (C)$
 $\text{SO}_3 = 2.0\% \quad (\bar{S})$
 $\text{Rest} = 2.8\%$

By Bouye's approximation.

$\text{C}_3\text{S} = 63.26\%$
 $\text{C}_2\text{S} = 12.86\%$
 $\text{C}_3\text{A} = 2.85\%$
 $\text{C}_4\text{AF} = 14.90\%$

Sum = 93.87% (clinker content)

문제점 1. 경험식에서 현상 환경, 혼화재(제)의 추가 사용 등에 의한 영향은 반영할 수 없어서 부정확하다.

문제점 2. Gypsum 등 다른 수화반응 생성물에 대해서는 알지 못한다.

기존 경험식이 가지고 있는 부정확함과 전체적인 분석이 어렵다는 점을 XRD 정량 분석으로 어느정도 보완할 수 있다. XRD는 비결정질의 분석에 약하다는 단점을 가지고 있다. 하지만 주어진 Clinker들은 모두 결정질이므로, XRD 시료를 통해 보다 정확한 분석이 가능할 것이다.

Problem 3.

$$\text{FCC of Aluminum} = \text{SC} + \begin{cases} (0,0,0) \\ (0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}) \\ (\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}) \\ (\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0) \end{cases}$$

Reciprocal vector $\vec{G}$ of SC.

$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad (\text{where, } \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x}, \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{y}, \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{z}).$$

Basis vector $\vec{r}_j$:

$$\vec{r}_1 = 0, \vec{r}_2 = \frac{1}{2}\vec{a}_1 + \frac{1}{2}\vec{a}_3 = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{z}, \vec{r}_3 = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}, \vec{r}_4 = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}$$

$$S_G = \sum_j f_j \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j).$$

$$= f + f \exp[-i\pi(k+l)] + f \exp[-i\pi(h+l)] + f \exp[-i\pi(h+k)]$$

$$\Rightarrow h, k, l \text{ 이 모두 홀수} \rightarrow \text{보강간섭. } (S_G = 4f).$$

$$\text{모두 짝수} \rightarrow \text{보강간섭. } (S_G = 4f).$$

$$\text{아니면} \rightarrow \text{상쇄간섭 } (S_G = 0).$$

$\Rightarrow$ Conventional cubic cell에 h, k, l 평면간 거리는 다음 식으로 구할 수 있다.

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \Rightarrow d = \sqrt{\frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2}} \text{ 이다.}$$

$d = \frac{\lambda}{2\sin\theta}$ 이므로, 가장 작은 회절각 (2θ) 4개를 찾으려면, 가장 큰 d -spacing 을 찾는 (h, k, l) plane 4개를 찾아야 한다. 계산하면 다음과 같다. $\checkmark$ ($\theta = \arcsin \frac{\lambda}{2d}, \lambda = 0.71 \text{ \AA}$)

(h, k, l)	$d (\text{\AA})$	θ	2θ	
$(2, 0, 0)$	2.025	10.10°	20.19°	2nd $h+k+l=2$
$(1, 1, 1)$	2.338	8.73°	17.47°	1st $h+k+l=3$
$(2, 2, 0)$	1.432	14.35°	28.71°	3rd $h+k+l=4$
$(4, 0, 0)$	1.013	20.51°	41.03°	$h+k+l=4$
$(3, 1, 1)$	1.221	16.90°	33.81°	4th. $h+k+l=5$
$(2, 2, 2)$	1.169	19.68°	39.36°	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	

고로, 가장 작은 회절각과 대응 plane은 다음과 같다.
(2θ)

$(1, 1, 1)$	17.47°
$(2, 0, 0)$	20.19°
$(2, 2, 0)$	28.71°
$(3, 1, 1)$	33.81°

Problem 4

(1) (A) FCC $\rho = \frac{n \cdot V_{\text{atom}}}{V_{\text{unit cell}}} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi (0.5 \text{ \AA})^3}{(3 \text{ \AA})^3} = 0.07757 = 7.76\%$

(B) BCC $\rho = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi (0.5 \text{ \AA})^3}{(3.5 \text{ \AA})^3} = 0.02442 = 2.44\%$

(2) (A) FCC : 4 atoms per unit cell.

Weight of an atom : $\frac{12 \text{ g/mol}}{\text{아보가드로 수/mol}} = \frac{12 \text{ g/mol}}{6.02 \times 10^{23} / \text{mol}} = 1.993 \times 10^{-23} \text{ g/atom}$

$\Rightarrow$ Unit cell weight of FCC = $4 \times (1.993 \times 10^{-23} \text{ g/atom})$
 $= 7.972 \times 10^{-23} \text{ g/unit cell}$

(B) BCC : 2 atoms per unit cell.

$\Rightarrow$ Unit cell weight of BCC = $2 \times (1.993 \times 10^{-23} \text{ g/atom})$
 $= 3.986 \times 10^{-23} \text{ g/unit cell}$

(3) (A) 와 (B) 의 Diffraction intensity 는 6:4 이다.

Diffraction intensity 는 Unit cell 의 겹수에 비례하므로, 상대 질량비는 여기에 Unit cell density 를 곱해줘야 한다. (A) 와 (B) 의 Unit cell density 의 비는 2:1 이므로, 샘플의 상대 질량비는 다음과 같다.

(A) : (B) = $6 \times 2 : 4 \times 1 = 3:1$ (상대 질량비)

Problem 5

Calcite 의 CO₂ 가 모두 결빙이 끊어져 날아가는 200°C 에서 각 시편 별 관여 중량은 다음과 같다. (그라운드부터 대강 추정하였다.)

	LPO	LP1	LP2	LP3	LP4
관여 중량(%)	27.2%	25.5%	23%	81%	19%
CO ₂ 손실(%)	0%	1.7%	4.2%	6.2%	8.2%

초기 중량의 각각 0%, 1.7%, 4.2%, 6.2%, 8.2% 가 CO₂ 는 손실된 것이므로,

Calcite_{measured} = $WL_{\text{Calcite}} \times \frac{m_{\text{Calcite}}}{m_{\text{CO}_2}}$ 또는 Calcite 의 percentage 를 구할 수 있다.

$m_{\text{Calcite}} = 100, m_{\text{CO}_2} = 44$ 이다.

	LP0	LP1	LP2	LP3	LP4	
Calcite, measured	0%	3.86%	9.55%	14.09%	18.64%	(Substitution ratio)

즉, 초기 수량의 위 코피 같은 바운드. Calcite가 차환되었다. 그리고, 이는 anhydrous content로 normalize 시키면 다음과 같다. 600°C 에서 모든 혼합물 Sample은 초기 수량의 89% 까지 질량이 감소했으므로, 이에 대해 Normalize 시킨다.

$$\text{Calcite, dry} = \frac{\text{Calcite, measured}}{(1 - \text{H}_2\text{O}_{\text{bound}})} = \frac{\text{Calcite, measured}}{\text{Weight at } 600^\circ\text{C}} = \frac{\text{Calcite, measured}}{89\%}$$

	LP0	LP1	LP2	LP3	LP4	
Calcite, dry	0	4.34%	10.93%	15.83%	20.94%	(Substitution ratio after normalization)

Problem 6.

FW	
AC	
CH	19%
C ₃ S	23%
C ₂ S	4%
TiO ₂	56%
Sum	= 100%

QXRD

Step 1.
IS 양 조정.

$$\begin{aligned} 19\% \times \frac{15\%}{56\%} &= 4.55\% \\ 23\% \times (15/56) &= 6.16\% \\ 4\% \times (15/56) &= 1.07\% \\ 56\% \times (15/56) &= 15\% \end{aligned}$$

$$\text{Sum of 결정질} = 26.78\%$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \text{Amorphous content} &= 100 - 26.78 \\ &= 73.22\% \end{aligned}$$

Step 2
IS 영향 배제.

$$\begin{aligned} 73.22 \times \frac{100}{(100-15)} &= 86.14\% \\ 4.55\% \times \frac{100}{(100-15)} &= 5.35\% \\ 6.16\% \times \frac{100}{(100-15)} &= 7.25\% \\ 1.07\% \times \frac{100}{(100-15)} &= 1.26\% \\ \text{Sum} &= 100\% \end{aligned}$$

Step 3.

BW에 대한 Solid 양 보정.
(BW = 29%).

$$\begin{aligned} \text{AC} \quad 86.14\% \times \frac{100}{(100-29)} &= 121.32\% \\ \text{CH} \quad 5.35\% \times \frac{100}{(100-29)} &= 7.54\% \\ \text{C}_3\text{S} \quad 7.25\% \times \frac{100}{(100-29)} &= 10.21\% \\ \text{C}_2\text{S} \quad 1.26\% \times \frac{100}{(100-29)} &= 1.79\% \end{aligned}$$

$$\text{Sum} = 140.84\%$$

고로, 초기 anhydrous content (100%)에 대해 normalize 시킨 각 상 (phase)의 비율은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \text{Amorphous content} &= 121.32\% \\ \text{CH (portlandite)} &= 7.54\% \\ \text{C}_3\text{S} &= 10.21\% \\ \text{C}_2\text{S} &= 1.79\% \\ \text{Total solid} &= 140.84\% \end{aligned}$$