

단층 그래핀시트의 모드 II 및 혼합모드 파괴

웬민키*·염영진*†

* 울산대학교 기계공학부

Mode II and Mixed Mode Fracture of Single Layer Graphene Sheet

Minh-Ky Nguyen* and Young-Jin Yum*†

* School of Mechanical Engineering, Univ. of Ulsan

(Received May 6, 2013 ; Revised December 2, 2013 ; Accepted December 9, 2013)

Key Words: Fracture of Grapheme(그래핀 파괴), Mode II Fracture Toughness(모드 II 파괴인성), Mixed Mode Fracture(혼합모드 파괴)

초록: 중앙에 균열을 갖는 단층 그래핀시트(single layer graphene sheet, SLGS)의 모드 II 파괴 거동을 원자 시뮬레이션과 해석 모델에 기초하여 고찰하였다. 지그재그 그래핀 모델의 파괴를 분자동역학(molecular dynamics, MD)에 의해 해석한 결과 모드 II 파괴인성은 $2.04\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ 인 것으로 밝혀졌다. 또한 SLGS의 이론적인 K_{IIc} 를 유도하기 위해 면내전단하중을 받는 다공체에 대한 파괴역학적 해석도 진행하였고 유한요소해석도 병행하였다. 모드 I 과 모드 II의 비를 다양하게 변화시켜가면서 SLGS의 혼합모드 파괴를 검토한 결과 혼합모드 파괴조건식이 얻어졌고 다른 문헌의 결과와 비슷함을 알 수 있었다.

Abstract: The mode II fracture behavior of a single-layer graphene sheet (SLGS) containing a center crack was characterized with the results of an atomistic simulation and an analytical model. The fracture of zigzag graphene models was analyzed with molecular dynamics and the mode II fracture toughness was found to be $2.04\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$. The in-plane shear fracture of a cellular material was analyzed theoretically for deriving the K_{IIc} of SLGS, and FEM results were obtained. Mixed-mode fracture of SLGS was studied for various mode I and mode II ratios. The mixed-mode fracture criterion was determined, and the obtained fracture envelope was in good agreement with that of another study.

1. 서론

그래핀에서 파괴 메커니즘의 기초적 이해는 과학적인 관심뿐만 아니라 실제적으로도 그래핀의 파괴를 방지하거나 조절하기 위해 중요하다.⁽¹⁾ 그래핀의 파괴해석을 할 때 다공체 해석이 사용되고 있다. 다공질 재료의 기계적 성질을 해석하기 위해 가벼운 구조물에 널리 사용되는 벌집 구조 셀벽(Cell wall)의 굽힘 모델이 제안되어 이용된다.⁽²⁾ 균열선단 바로 앞의 셀벽은 *K-field*로부터 균열면 위에 작용하는 수직 트래션(Traction)에 의한 굽힘 때문에 파손된다. 육각형 벌집구조에 대한 모드 II 파괴인성을 예측하는 데에도 비슷한 방법을 이용

한다. Maiti 등⁽³⁾은 다공질 재료의 모드 I 파괴인성식을 유도하기 위해 연속체 모델의 균열선단 부근 특이인장응력(Near-tip singular tensile stress)을 이용하여 셀벽의 굽힘모델을 활용하였다. 결과는 다공질 재료의 K_{IC} 가 셀 크기, 상대밀도 그리고 셀벽의 파단계수(Modulus of rupture)에 의존함을 보여주었다. 모델링에서 셀벽의 파단계수는 일정하다고 가정하였다. 실제 취성 셀벽의 파단계수는 주로 셀 크기 효과를 주는 체적에 의해 제어된다. 14면체(Tetrahedron) 단위 셀로 이루어진 개방셀 폼(Open-cell foam)의 파괴인성은 미시역학 모델에 기초한 유한요소법을 사용하여 균열 진전 시뮬레이션에 의해 예측되었다.⁽⁴⁾ 모드 I 파괴를 모사하기 위해 두 가지 미시역학 모델⁽⁵⁾이 개발되었다. 두 모델은 폼의 단위 셀을 정육면체로 가정하고 균열선단을 둘러싼 좁은 영역은 유한요소를 사용

† Corresponding Author, yjyum@ulsan.ac.kr

© 2014 The Korean Society of Mechanical Engineers

하여 모델링 하였다. 균열은 주 재료 방향들 중 하나와 평행하도록 설정하였다. 이 때 경계조건은 직교이방성 재료에 대한 선형탄성 파괴역학으로부터 y 방향 변위가 1 이 되도록 x 방향과 y 방향 변위를 계산하여 경계에 가하도록 하였다. 유한요소 해석으로부터 균열선단 요소의 파괴를 일으킬 응력확대계수 K_I 이 결정되었고, 이것이 다공질 재료의 파괴인성으로 선택되었다. 나노 물질의 파괴를 연구하기 위해 분자동역학(Molecular dynamics, MD)을 사용한 새로운 기술이 제시되었다. Jin 과 Yuan⁽⁶⁾은 원자 시뮬레이션과 연속체 모델을 사용하여 거시적 파괴 변수들을 조사하였고, 원자 시뮬레이션과 연속체 모델로부터 계산한 균열선단 부근 응력장은 연속체 응력과 잘 맞는 것을 보였다. 그래핀의 단층 변형의 미시적 메커니즘과 파괴는 양자역학의 틀 안에서 조사되었다.⁽⁷⁾ 분자동역학 시뮬레이션⁽⁸⁾은 균열성장 과정 동안 그래핀 표면 위에서 형성할 수 있는 리지 결함(Ridge defect)의 원인을 알아보기 위해 사용되었다. 그래핀의 기계적 반응 및 변형 후 표면 특성을 결정하기 위해 인장, 압축 그리고 전단 변형률을 그래핀 시트 모델에 적용하였다. 전단에 의해 그래핀 시트의 대각선 방향으로 산마루가 형성되는데 이것은 실험결과와 비슷하고 모아래 줄무늬를 나타내는 것으로 보아 전단변형률이 산마루 결함의 형성에 중요한 역할을 함을 알 수 있다. 그래핀 시트(Graphene sheet, GS)와 탄소나노튜브(Carbon nanotube, CNT)⁽⁹⁾는 기계적, 전기적으로 중요한 성질을 가지기 때문에 많은 주목을 받아 온 나노 구조물이다. 서로 다른 크기의 GS 와 CNT 의 동적 및 정적 파괴 성질은 나노 구조물의 비선형 대변형을 시뮬레이션 할 수 있는 경험에 의한 원자간 포텐셜 함수(empirical inter-atomic potential function)에 기초하여 연구되었다. 면내 전단변위를 받는 단층 그래핀 시트 주름의 발생과 성장이 연구되었다.⁽¹⁰⁾ 원자 시뮬레이션 결과 원자 배치 때문에 균열선단 주변에 응력 특이성이 없으므로 연속체 역학에 일반적으로 사용되는 응력확대계수 개념은 그래핀 시트의 원자론적 균열 거동을 모델링 하는데 적합하지 않다고 밝혔다.⁽¹¹⁾ 유한요소 결과와 원자 시뮬레이션 결과를 비교한 결과 연속체 모델에서 얻은 변형에너지방출률이 동일한 하중조건에서의 이산 모델과 유사함을 알 수 있었다.

본 연구에서는 지그재그 배열을 갖는 단층 그래핀 시트의 모드 II 파괴를 고찰하려고 한다. 먼저 MD 시뮬레이션을 사용하여 단계적으로 해석하고

SLGS 의 전단 과정을 제어하여 응력확대계수를 밝혀낸다. 모든 원자간 상호작용은 공유결합의 형성 및 분리뿐만 아니라 비접촉 상호작용을 표현하는 AIREBO⁽¹²⁾ 상호작용 포텐셜로 모델화한다. 고전 분자동역학 코드 LAMMPS(Large-scale atomic molecular massively parallel simulator)⁽¹³⁾를 사용하여 SLGS 에서의 균열 성장률 진전을 알아보고 균열 성장 동안 균열선단 주변의 관련된 원자들의 위치를 평가하기 위해 원자 시뮬레이션을 수행한다. 이 때 SLGS 의 파괴인성을 결정하기 위해 Gibson 과 Ashby,⁽²⁾ Maiti⁽³⁾ 등이 수행한 것과 같은 방법으로 접근한다. 그래핀 구조물은 벌집형 구조물과 유사함이 확인되었으므로 선형 탄성 파괴역학의 균열선단 부근 특이응력장 뿐만 아니라 각종 치수, 셀벽의 굽힘 모델들이 SLGS 의 모드 II 파괴를 해석하기 위해 사용된다. 이 방법은 Thiyyagasundaram⁽⁴⁾와 Choi⁽⁵⁾에 의해 사용되어 왔다. 모드II 파괴인성치를 구한 후 혼합모드 파괴도 고찰하여 다양한 하중각도에 따른 SLGS 의 파괴조건을 구하려고 한다.

2. 분자동역학 시뮬레이션

그래파이트 구조물은 육각 패턴으로 배열된 탄소 원자들로 이루어진 탄소층으로 구성되어 있다. 지그재그 배열을 갖는 그래핀 시트의 나노 기계적 성질을 분자동역학 시뮬레이션으로 해석하였다. 그래핀 시트에서 길이 $2c$ 의 중앙 균열은 균열면 상하의 원자 한 쌍 사이의 공유결합을 없애서 만들었기 때문에 원자간 상호작용은 발생하지 않는다. 중앙 균열을 포함한 그래핀 시트의 모양은 Fig. 1에 나타내었다.

모델은 측면 길이가 $100 \times 100 \text{ \AA}$ 인 사각형 그래핀 시트로 만들었고 모든 원자간 상호작용은 공유

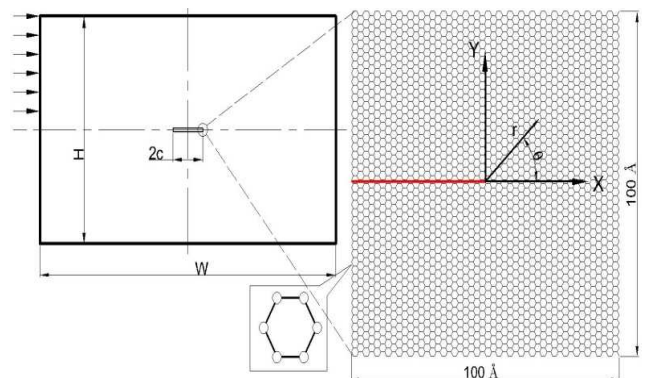


Fig. 1 The dimension of the graphene sheet with center crack where W (width) and H (height); (O) represents a carbon atom

결합의 형성 및 분리뿐만 아니라 비접촉 상호작용을 표현하는 AIREBO 상호작용 포텐셜로 모델링하였다. 균열 성장 과정을 시뮬레이션 하기 위해 다음과 같은 전단균열(모드 II) 변위장⁽¹⁴⁾을 시트의 경계에 적용한다.

$$\begin{aligned} u_x &= \frac{K_{II}}{2\mu} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \sin \frac{\theta}{2} \left[(\kappa + 1) + 2\cos^2 \frac{\theta}{2} \right] \\ u_y &= \frac{K_{II}}{2\mu} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \cos \frac{\theta}{2} \left[(1 - \kappa) + 2\sin^2 \frac{\theta}{2} \right] \end{aligned} \quad (1)$$

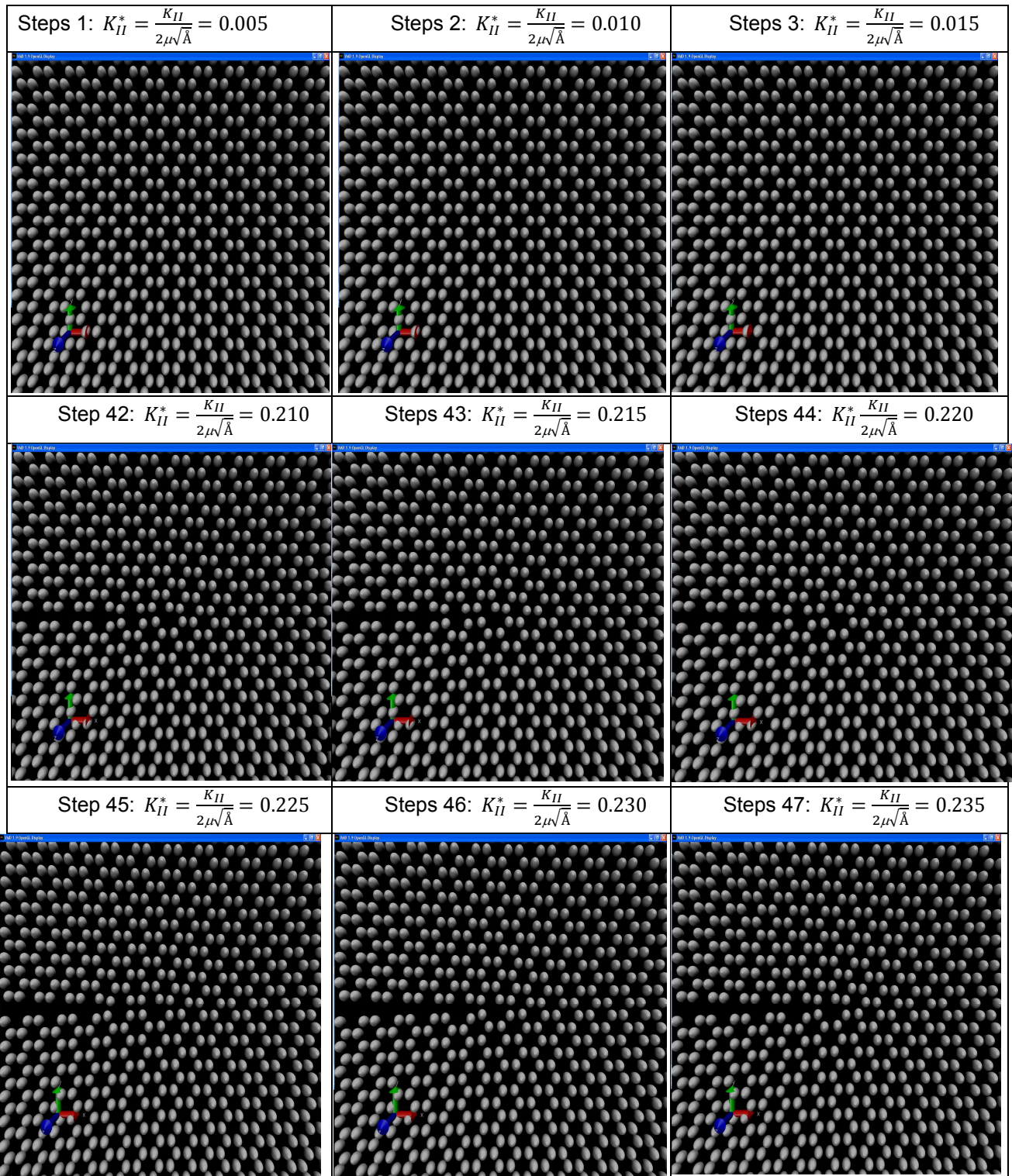


Fig. 2 Atomic position at different load steps

여기서 μ 는 전단탄성계수이고 $\kappa = \frac{3-\nu}{1+\nu}$ (평균응력), ν 는 푸아송 비이다.

지그재그 모서리가 x 축을 따라 향하도록 하는 그래핀 시트를 고려한다. 기계적 성질을 얻기 위해 변형률 속도를 증가시키며 전단하중을 좌표방향을 따라 적용시킨다. x 방향 하중은 지그재그 그래핀 시트가 전단변형을 받고 있는 것을 의미한다. 하중 증분은 한 개씩의 원자 결합이 단계적으로 부서질 수 있도록 충분히 작게 하였다. MD 시뮬레이션은 모델링 코드 LAMMPS^(13,15)를 사용하여 수행되고 시스템의 에너지 최소화는 LAMMPS 코드에 적용된 에너지 수렴 기준과 함께 공액 구배 알고리즘(Conjugate gradient algorithm)을 사용하여 수행된다. 해석 방법은 SLGS 에서의 횡방향 균열 문제^(16,17)에 의한 것과 비슷하고 다음과 같다.

분자동역학 시뮬레이션으로부터 지그재그 그래핀 시트의 모드 II 파괴인성치를 얻는 과정이 Fig. 2 에 나타나 있다. 균열 성장은 K_{II} 에 의해 특징지어지고 미끄럼 모드에서 K_{II} 를 무차원화한 값은 아래와 같다.

$$K_{II}^* = \frac{K_{II}}{2\mu\sqrt{\text{\AA}}}$$

K_{II}^* 를 0,005 씩 증가시키면서 VMD(Visual molecular dynamics) 프로그램으로 관찰한 결과 하중 스텝 46 회에서 원자들 위치의 갑작스런 변화가 발생한다. 이 때 증분 0.0005 는 균열 진전 시점을 잡기 쉬우면서 계산량이 불필요하게 많아지지 않도록 시행착오를 거쳐서 선정했다.

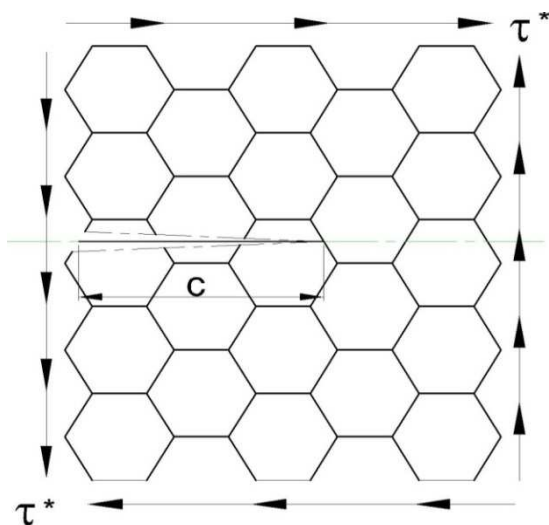


Fig. 3 An infinite SLGS with a crack under a uniform in-plane shear stress

$$\frac{K_{IIC}}{2\mu} = 0.230(\sqrt{\text{\AA}})$$

이로부터 그래핀의 모드 II 임계응력확대계수는 $K_{IIC} = 2.04\text{MPa}\sqrt{m}$ 로 계산되었다.

3. 그래핀 시트 모델에 대한 허니컴 구조해석

3.1 배경 이론

선형 탄성 파괴역학은 그래핀 재료의 균열을 연구하는 데 유용한 도구로 알려져 왔다. 파괴인성 해석의 목적은 임계응력확대계수를 결정하는 것이고 이것은 구조물 부재의 설계 시 파괴에 대한 저항하는 특성을 나타내는데 사용된다. SLGS(Single layer graphene sheet, 단일층 그래핀 시트)의 면내 전단 거동은 특별한 원자-연속체 모델(Atomistic-continuum model)을 사용하여 해석되는데, 여기서 C-C 결합은 전단 하중에 의한 굽힘과 축 방향 신장을 받는 보와 균질화 접근법에 의한 그래핀 물성에 의해 나타내어 진다. 이 파괴 거동은 특정 면의 패턴 구조와 관련 있는 각도가 상대적으로 작기 때문에 균열이 제시된 형상을 따르는 것으로 설명될 수 있다. 즉 균열 진전이 원래 균열 방향과 같음을 의미한다.

Fig. 3에 보이는 것과 같이 모서리 균열을 갖는 그래핀 시트의 전단 파괴 거동을 알아본다. 취성 그래핀 시트의 파괴 거동은 육각형 구조의 파괴인성을 예측하기 위해 선형 탄성 파괴역학(LEFM) 개념을 사용하였다. 이에 상당하는 선형탄성 연속체 응력장이 균열선단 바로 앞 격자의 셀벽에 작용하는 응력을 계산하기 위해 사용되었다.

무한한 곳에 작용하는 전단응력 τ^* 와 평행하게 놓여있는 탄성체 속 길이 c 의 균열은 특이 국부 전단 응력장 τ_l 을 발생시킨다.⁽¹¹⁾

$$\tau_l = \frac{r^* \sqrt{\pi c}}{\sqrt{2\pi r}} \tag{2}$$

여기서 r 은 균열선단에서부터의 거리로서 셀 폭의 반이다.

3.2 지그재그 하중에 대한 기하학적 형상

Fig. 4에 보이는 그래핀 시트의 균열선단 앞 전단응력(τ_{xy}) 분포는 다음과 같다.

$$K_{II} = \tau_{xy} \sqrt{2\pi r} \tag{3}$$

균열면을 따라 면내 전단응력 τ_{xy} 는 다음과 같다.

$$\tau_{xy} = \frac{\tau^* \sqrt{\pi c}}{\sqrt{2\pi r}}$$

여기서

$$r = \frac{l + l \cos \theta}{2}$$

이고 l 은 셀벽의 길이를 나타낸다.

$$\tau_{xy} = \tau^* \sqrt{\frac{c}{l + l \cos \theta}}$$

셀벽의 길이 l 에 작용하는 전체 전단력 F 는 다음과 같이 표현된다.

$$F = l \sin \theta \int_0^l \tau_{xy} dr = \left(\tau^* l \sin \theta \sqrt{\frac{c}{2}} \right) 2\sqrt{l}$$

파단되지 않는 첫 번째 셀벽에 가해지는 굽힘 모멘트는 F 에 비례한다.

$$M \propto F \frac{l}{2} = \tau^* l^2 \sin \theta \sqrt{\frac{lc}{2}}$$

파단되지 않는 첫 번째 셀벽의 임계 응력 (Critical skin stress)은 다음과 같이 계산될 수 있다.

$$\sigma_c \propto \tau_{max}$$

최대 굽힘 전단 응력은 다음과 같다.

$$\tau_{max} \propto M \frac{\bar{y}}{I}$$

$$\tau_{max} \propto \frac{32}{\pi d^3} \tau^* l^2 \sin \theta \sqrt{\frac{lc}{2}}$$

d 는 셀 벽의 직경을 나타낸다.

$\theta = 60^\circ$ 인 그래핀 시트일 때,

$$\tau_{max} \propto \frac{8}{\pi d^3} d^2 \sqrt{6lc}$$

만약 응력이 셀벽 재료의 파괴강도를 초과할 때 파괴가 발생한다면

$$\frac{(\tau_f)_2}{\tau_{fs,2}} = \frac{\pi d^3}{8\sqrt{6}l^2\sqrt{lc}}$$

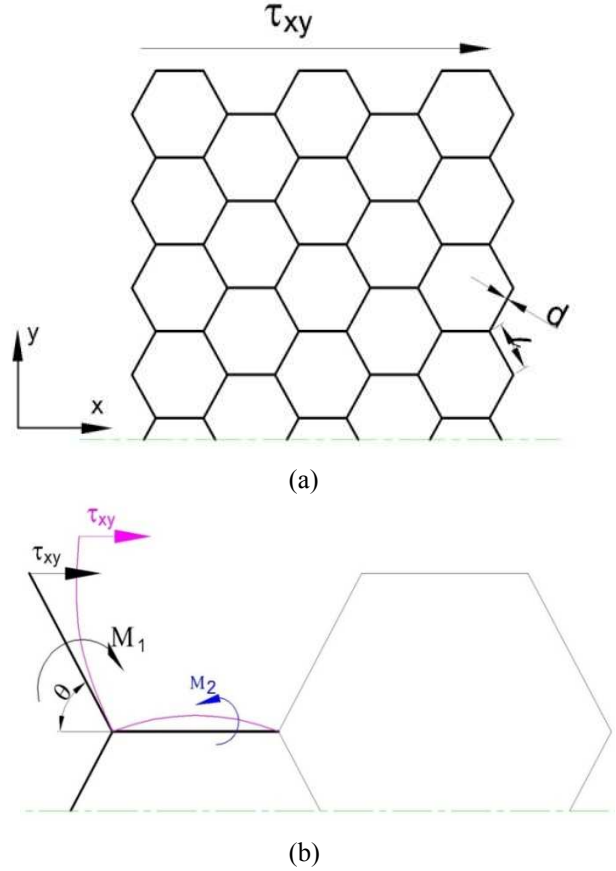


Fig. 4 Mode II fracture of graphene sheet (a) The local stress field (b) The moments and the stress in the zigzag cell wall ahead of the crack tip

전단 파괴는 응력확대계수가 파괴인성에 도달할 때 발생할 것이다.

$$K_{IIc} = \tau_f \sqrt{\pi c}$$

따라서 위 결과들을 종합하면 지그재그 방향 $K_{IIc,2}$ 파괴인성은 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$K_{IIc,2} = \tau_{fs} \frac{\pi\sqrt{\pi}d^3}{8\sqrt{6}l^2\sqrt{l}} \quad (4)$$

4. 그래핀 시트의 유한요소해석

탄소-탄소 결합은 Scarpa 등⁽¹⁸⁾이 제시한 것처럼 Fig. 4(a)와 같이 길이(l)는 1.38 Å, C-C결합 두께(d)는 0.84 Å가 되도록 가정된 보 요소에 의해 시뮬레이션 된다. 물성치는 Liu 등⁽¹⁹⁾이 제시한 대로 탄성계수 $E=1050\text{GPa}$, 포와송 비 $\nu=0.186$ 가 사용되었다. 연속체 모델 파괴가 유효한 제한 균열 크기를

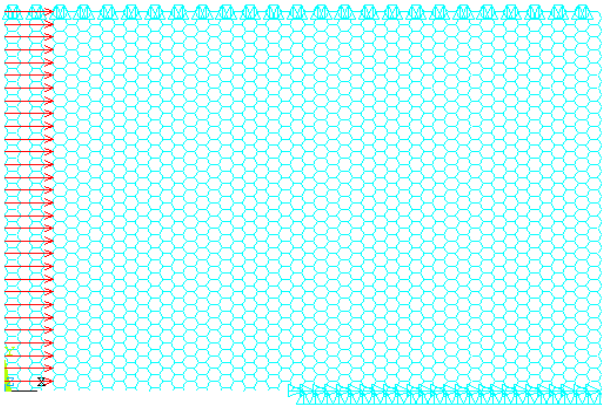


Fig. 5 FEM model of SLGS

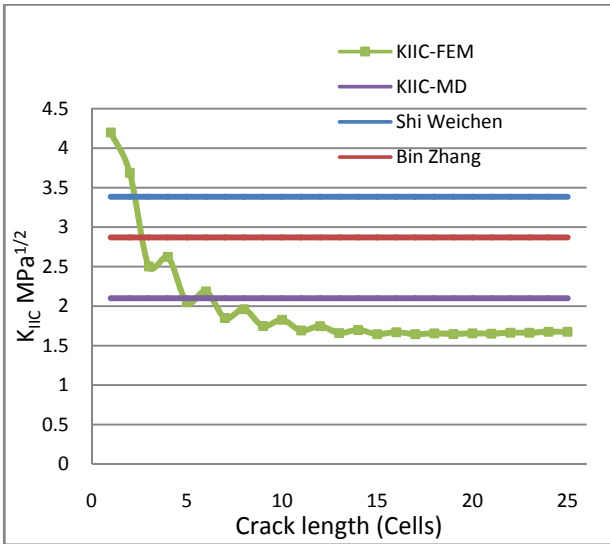


Fig. 6 Comparison of Mode II fracture toughness for SLGS with previous results

연구하기 위해 연속체 모델에서 제시된 파괴인성과 유한요소해석을 사용하여 계산한 것과 비교하였다. 유한요소해석은 격자 50x30 셀(Fig. 5)을 사용하였고 지그재그 방향 그래핀 시트의 셀벽의 모델링을 위해 ANSYS 12.1⁽²⁰⁾을 사용하였다. 셀의 가장 바깥쪽 층에 작용하는 응력 분포는 균일하고 균열선단에서 멀리 떨어진 응력장은 변화가 없다고 가정한다. 해석으로부터 각 부재의 양 끝에 작용하는 힘과 모멘트를 얻을 수 있고 이것으로부터 균열선단 앞 첫 번째 파괴되지 않는 셀 모서리의 임계표면응력이 계산될 수 있다. 파손은 임계표면응력이 셀벽의 파단계수(Modulus of rupture)에 도달할 때 발생하며 파단계수는 이미 일정하다고 가정을 하였다.⁽²¹⁾ 식 (4)로부터 파단계수를 계산한 결과 27.89MPa를 얻을 수 있었고 균열 길이들을 25가지로 변화시켜 가면서 해석하였다. (c = 1,2,3... 25

Table 1 Comparison of fracture toughness

No.	Authors	Fracture toughness of SLGS (MPa√m)
1	FEM (present work)	1.68
2	MD Theory (present work)	2.04
3	Shi Weichen ⁽²²⁾	3.3839 (AC)
4	Bin Zhang ⁽²³⁾	2.87

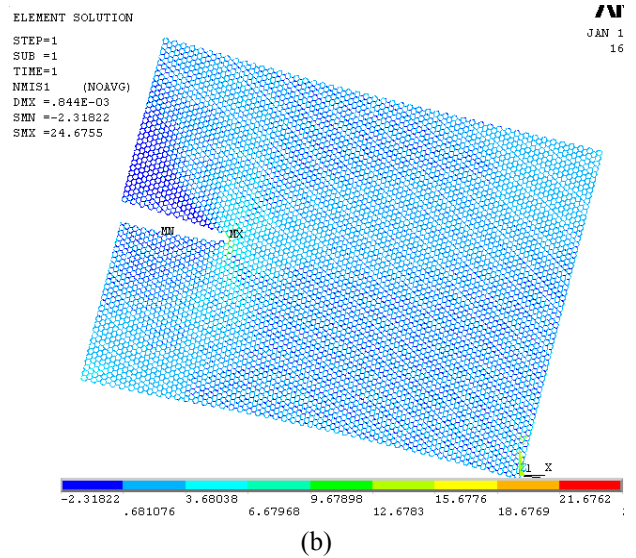
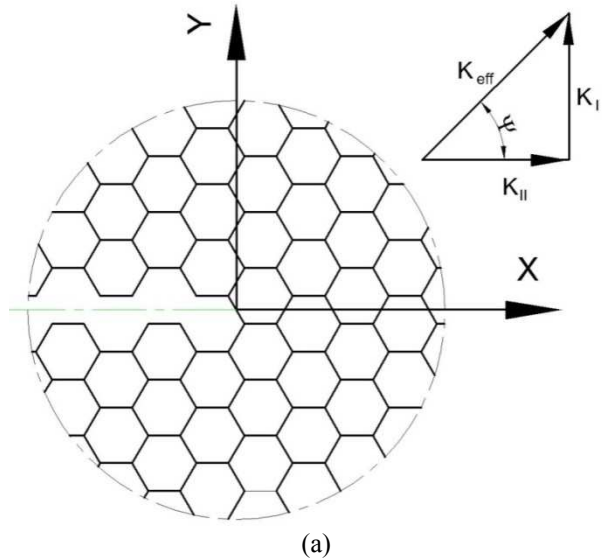


Fig. 7 Finite element analysis of SLGS (a) modeling for mixed mode loading (b) deformed shape of SLGS with crack length equal to 25 cells and phase angle $\Psi=15^\circ$

cells.)

식 (4)의 타당성을 검증하기 위해 그래핀 시트의 유한요소모델에 대하여 ANSYS 상용 소프트웨어로 해석했다. Fig. 6의 결과를 보면 균열길이가 셀벽 길이의 10 배 이상이 되면 파괴인성치가 거의 일정해지고 이 값은 다른 문헌의 결과들보다 낮고 MD 결과와 유사한 것을 알 수 있다.

단 Table 1에서와 같이 Shi Weichen⁽²²⁾의 모델은 armchair 모델로서 본 연구에서 택한 zigzag 모델과는 다르다.

5. 혼합모드 파괴인성치와 파괴조건식

SLGS의 혼합모드 파괴 해석을 위하여 Arcan 시편^(24,25)을 이용한 여러 가지 다른 혼합모드 하중 조건에 대하여 FEM으로 해석하였다. 금속재료나 복합재료에 대한 혼합모드 파괴 해석 연구는 국내에서도 많이 수행^(26,27) 되었지만 SLGS에 대한 혼합모드 파괴해석은 찾아 볼 수 없다. Arcan 시편을 이용하면 SLGS의 혼합모드 파괴 해석을 위한 모드 I, 모드 II 그리고 어떠한 모드 I 과 모드 II 하중 조합이라도 구현할 수 있게 된다(Fig. 7).

위상각 Ψ (하중 혼합계수 또는 상당 균열각도)는 다음과 같이 정의된다.

$$\Psi = \tan^{-1}\left(\frac{K_I}{K_{II}}\right)$$

기하학적 형상과 경계조건은 4장에서 언급한 바와 같다. 임계응력확대계수는 균열선단에서의 최대 응력으로부터 유도되었다. K_I 과 K_{II} 는 FEM 시뮬레이션을 사용하여 계산되었다. 모드 I 하중 성분이 커질수록, 즉 위상각 Ψ 가 0° 부터 90° 까지 증가할수록 K_I 은 증가하고 K_{II} 는 감소한다. 하중 각도 $\Psi \geq 45^\circ$ 에서 모드 I의 기여도가 모드 II의 기여도보다 크므로 열림 모드 파괴가 지배적이 되고 $\Psi \leq 45^\circ$ 에서는 반대로 전단 모드 파괴가 지배적이 된다.

혼합 모드 하중에서는 모드 I, 모드 II 두 파괴 모드 사이에 상호작용이 있고 모드 I 과 모드 II 응력확대계수의 관계를 찾는 것이 필요하다. 일반적으로 다음과 같은 형태의 파괴조건식이 제시된다.⁽²⁸⁾

$$\left(\frac{K_I}{K_{IC}}\right)^m + \left(\frac{K_{II}}{K_{IIC}}\right)^n = 1$$

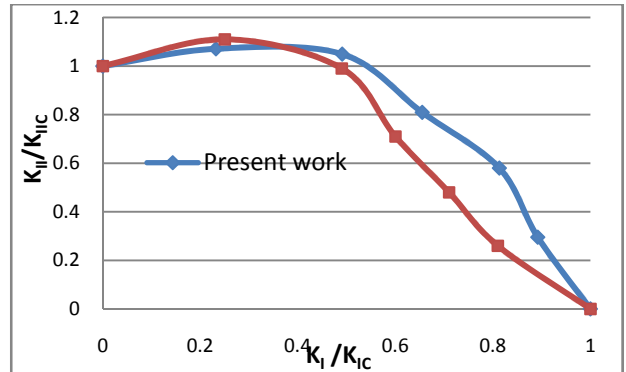


Fig. 8 Normalized mixed-mode fracture envelope

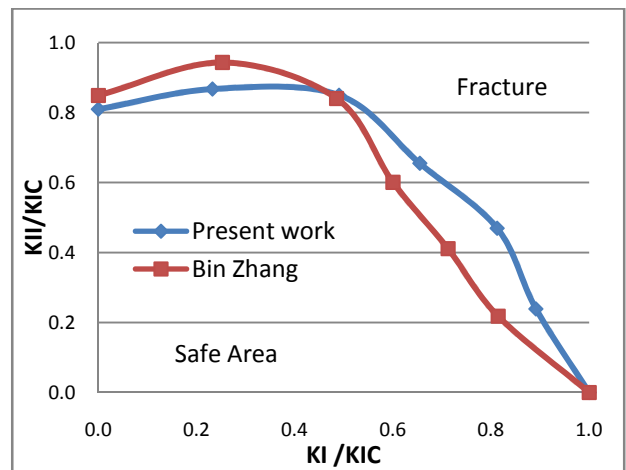


Fig. 9 Normalized prediction of the mixed mode fracture criteria of SLGS

이 식에서 m 이 n 보다 크면 모드 I의 기여도가 크고 m 이 n 보다 작으면 모드 II의 기여도가 크다고 볼 수 있다. SLGS 파괴인성은 서로 다른 혼합모드 하중 조건 하에서 다양한 위상각에 대한 유한요소 해석에 의해 결정되었다. Fig. 8에 보이는 것과 같이 $K_I/K_{IC} - K_{II}/K_{IIC}$ 선도를 그려본 결과 큰 차이는 없지만 그 중에서 $m=2, n=2$ 인 타원방정식 ($K_{IC} \neq K_{IIC}$)이 Bin Zhang⁽²³⁾의 혼합 모드 파괴 기준을 특징짓는데 적합한 것을 볼 수 있다.

Fig. 8, 9에 Bin Zhang⁽²³⁾의 유한요소 결과와 MD 시뮬레이션 결과를 나타냈다. 혼합모드 FEM 결과는 $K_{II}/K_{IIC} - K_I/K_{IC}$ 와 $K_I/K_{IC} - K_I/K_{IC}$ 두 가지 무차원 응력확대계수로 나타내었는데, Bin Zhang의 파괴 기준과 상당히 근사한 것을 보여주었다.

6. 결론

지그재그 SLGS의 모드 II 파괴의 분자역학모델

해석을 시행한 결과 $K_{IIC} = 2.04 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ 임을 알 수 있었다. SLGS 의 이론적인 파괴인성치를 구하기 위하여 다공체에 대한 모드 II 파괴 해석 결과 인성치에 대한 이론식을 얻었고 이로부터 얻은 $K_{IIC} = 1.7 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ 로서 MD 에 의한 결과와 비슷하였다. SLGS 의 혼합모드 I-II 의 균열 진전은 Arcan 시편에 의해 예측될 수 있었고 Bin Zhang 의 결과와 수치해석 결과를 비교한 결과 MD 시뮬레이션 결과와 비교적 잘 일치하는 것을 보여주었다.

참고문헌

- (1) Zhu, T., Li, J., Ogata, Shigenobu and Yip, S., 2009, "Mechanics of Ultra-Strength Materials," *Materials Research Society Bulletin*, 34, pp.167~172.
- (2) Gibson, L.-J. and Ashby, M.-F., 1997, "Cellular Solids: Structure and Properties," *Cambridge: Cambridge University Press*, 2nd ed.
- (3) Maiti, S.-K., Ashby, M.-F. and Gibson, L.-J., 1984, "Fracture Toughness of Brittle Cellular Solids" *Scripta Metall.*, 18, pp. 213~217.
- (4) Thiyagasundaram P., Wang, J., Sankar B. V. and Arakere N. K., 2011, "Fracture Toughness of Foams with Tetraikadecahedral Unit Cells Using Finite Element Based Micromechanics," *Engineering Fracture Mechanics*, 78, pp. 1277~1288.
- (5) Choi, S and Sankar, B.-V, 2003, "Fracture Toughness of Carbon Foam," *Journal of Composite Materials*, Vol. 37, No. 23, pp. 2101~2116.
- (6) Jin, Y. and Yuan, F.-G, 2005, "Nanosopic Modeling of Fracture of 2D Graphene Systems," *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 5, pp. 601~608.
- (7) Yanovsky, Yu.G., Nikitina, E.A., Karnet, Yu.N. and Nikitin, S.M., 2009, "Quantum Mechanics Study of the Mechanism of Deformation and Fracture of Grapheme," *Physical Mesomechanics*, Vol. 12, Issues 5~6, pp. 254~262.
- (8) Udupa, A. and Martini, A., 2011, "Model Predictions of Shear Strain-Induced Ridge Defects in Grapheme," *Carbon* 49, pp. 3571~3578.
- (9) Niaki, S.-A., Mianroodi, J.-R., Sadeghi M. and Naghdabadi, R., 2012, "Dynamic and Static Fracture Analyses of Graphene Sheets and Carbon Nanotubes," *Composite Structures*, 94, pp. 2365~2372.
- (10) Wen, H.-D., Gong, K. and Wang, Q., 2011, "Controlling the Formation of Wrinkles in a Single Layer Graphene Sheet Subjected to In-Plane Shear," *Carbon* 49, pp. 3107~3112.
- (11) Tsai, J.-L., Tzeng, S.-H. and Tzou, Y.-J., 2010, "Characterizing the Fracture Parameters of a Grapheme Sheet Using Atomistic Simulation and Continuum Mechanics," *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 47, Issues 3~4, pp. 503~509.
- (12) Stuart, S.-J, Tutein, A.-B. and Harrison, J.-A., 2000, "A Reactive Potential for Hydrocarbons with Intermolecular Interactions," *J. Chem Phys.* Vol. 112, Issue 14, pp. 6472~6486.
- (13) Plimpton, S.-J., 1995, "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics," *J. Comp. Phys.* 117, pp. 1~19.
- (14) Anderson, T.-L., 1995, "Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications," *CRC Press*.
- (15) <http://lammps.sandia.gov/>;
- (16) Steven, C and Buehler, M.-J., 2011, "Twisted and Coiled Ultralong Multilayer Graphene Ribbons," *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 19, 054003, p. 20.
- (17) Qi, Z., Zhao, F., Zhou X., Sun, Z., Park, H.-S and Wu, H., 2010, "A Molecular Simulation Analysis of Producing Monatomic Carbon Chains by Stretching Ultra Narrow Graphene Nanoribbons," *Nanotechnology*, 21, 265702.
- (18) Scarpa, F., Adhikari, S. and Phani A.-S., 2009, "Effective Elastic Mechanical Properties of Single Layer Graphene Sheets," *Nanotechnology*, 20, 065709.
- (19) Liu, F., Ming, P. and Li, J., 2007, "Ab Initio Calculation of Ideal Strength and Phonon Instability of Graphene Under Tension," *Physical Review B*, 76, 064120.
- (20) ANSYS User's Manual, Version 12.1, 2009 (ANSYS Software Inc.).
- (21) Huang, J.-S. and Gibson, L.-J, 1991, "Fracture Toughness of Brittle Honeycombs," *Acta Metallurgica et Materialia*, 39, pp. 1627~1636.
- (22) Shi, W., Mu, G. and Li, H., 2008, "Relationship Between the Stress Intensity Factors and Bond σ in Graphene Sheet," *Int J Fract*, 149, pp. 105~111.
- (23) Bin Zhang, Mei L., and Xiao H., 2012, "Nanofracture in Graphene Under Complex Mechanical Stresses," *Applied Physics Letters*, 101, 121915.
- (24) Banks, S.-L., Arcan, M. and Bortman, Y., 1984, "A Mixed Mode Fracture Specimen for Mode II Dominant Deformation," *Engng Fract Mech*, 20(1), pp. 145~157.
- (25) Banks, S.-L. and Arcan, M., 1986, "A Compact Mode II Fracture Specimen, Fracture Mechanics," *ASTM STP*, 905, Vol. 17, pp. 347~363.
- (26) Shim, J.R., Lee, Y.S., Kim, D.H., Beom, H.G. and Kang, K.J., 2002, "Measurement of Fracture Toughness J_c Under Mixed Mode Loading Using Unloading Compliance Method," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. A*, Vol. 26, No. 1, pp. 113~120.
- (27) Yum, Y.J. and You, H., 1999, "Strain Energy

Release Rate of Carbon/Epoxy Composite Material under Mixed Mode Delamination,” *The Journal of the Korean Society for Composite Materials*, Vol. 12, No. 3, pp. 66~74.

(28) Spencer, B. and Barnby, J.T., 1976, “The Effects of Notch and Fibre Angles on Crack Propagation in Fibre-Reinforced Polymers,” *Journal of Materials Science*, Vol. 11, Issue 1, pp.83~88.