

Cu 기반 그래핀 나노복합재료에서 균열이 기계적 성능 및 파괴거동에 미치는 영향

The Effect of Cracks on Mechanical Performance and Fracture in Cu-based Graphene Nanocomposites

김송미* · 박우림* · 권오현**†
Song-Mi Kim*, Woo-Rim Park* and Oh-Heon Kwon**†

(Received 14 June 2021, Revision received 26 July 2021, Accepted 29 July 2021)

Abstract : The research has conducted about Cu-based graphene nanocomposites which utilize the graphene as an electronic device. It is important to evaluate the effect of cracks on mechanical performance and fracture behaviors in Cu-based graphene nanocomposites because of the possibility of performance degradation from the defects inevitably occurring interface. In this study, the mechanical properties and fracture behaviors of the multilayer Cu/graphene nanocomposite materials were evaluated about the effect of defects. The molecular dynamics evaluation method (Molecular Dynamics Simulation: MDS) was used to analyze microscopic physical phenomena. From the results, stress distributions were found depending on the position that the defect occurs. Higher stress was generated in the graphene layer even though the first delamination crack occurred in the Cu layer.

Key Words : Cu-based graphene nanocomposites, Mechanical performance, Fracture, Molecular dynamics

1. 서 론

탄소로 구성된 그래핀은 $15,000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ 의 전이동도, 0.5~1 TPa의 탄성계수, 약 130 GPa의 인장응력 등의 물성을 가져, 물리적, 기계적 성질이 매우 우수하다.¹⁾ 이러한 그래핀이 기계적으로 개별적인 독립된 개체로 박리가 가능하다는 사실

이 입증된 이후 그래핀 기반 전자장치의 제작을 위한 연구나 반도체 부품 연결 전선, 금속 잉크 등으로 활용하기 위한 많은 연구가 진행되고 있다.²⁻⁴⁾ 특히, 전자장치에 활용하기 위하여 그래핀 기반 전자장치의 제작을 위한 복합재로써 전기적 효율이 뛰어난 Cu가 응용되어 다양한 연구가 진행되고 있다. 이는 그래핀을 단독으로 사용하기

**† 권오현(ORCID:https://orcid.org/0000-0003-4026-293X) : 교수, 부경대학교 안전공학과
E-mail : kwon@pknu.ac.kr, Tel : 051-629-6469
*김송미(ORCID:https://orcid.org/0000-0002-2356-3776) : 대학원생, 부경대학교 안전공학과
*박우림(ORCID:https://orcid.org/0000-0002-1639-3924) : 박사, 부경대학교 안전공학과

**† Oh-Heon Kwon(ORCID:https://orcid.org/0000-0003-4026-293X) : Professor, Department of Safety Engineering, Pukyong National University.
E-mail : kwon@pknu.ac.kr, Tel : 051-629-6469
*Song-Mi Kim(ORCID:https://orcid.org/0000-0002-2356-3776) : Graduate student, Department of Safety Engineering, Pukyong National University.
*Woo-Rim Park(ORCID:https://orcid.org/0000-0002-1639-3924) : Ph.D., Department of Safety Engineering, Pukyong National University.

보다는 기존에 사용 중인 금속재료와 복합하여 사용함으로써 서로의 단점을 보완하는 방식이다. 그래핀은 다른 탄소 동소체인 탄소나노튜브에 비해 2D 구조로 인하여 고압처리 과정에서 좌굴과 파단에 유리하고, 비표면적이 높아서 다른 재료와 결합시 서로 상호작용할 수 있는 영역을 다른 탄소 동소체와 비교하여 더 많이 제공하는 특성을 가진다.⁵⁾ 하지만 서로 다른 두 재료의 결합으로 생성되는 복합재료는 별개의 새로운 물성이 생성되며, 이와 동시에 필연적으로 발생하는 계면으로 인한 성능저하의 문제를 갖게 된다. 따라서 그래핀을 금속과 복합재료로써 활용하기 위해서는 먼저 금속/그래핀 복합재료의 제조과정에서 발생할 수 있는 결합에 대한 분석이 선행되어야 한다. 결합은 재료의 결정학적 방향에 따라 달라질 수 있으며, 그래핀의 경우 구조적으로 지그재그와 암체어 방향의 결합이 존재한다.⁶⁾ 또한 그래핀은 대면적·고순도 그래핀 제작에 적합한 화학기상증착법으로 생성될 때 10층 미만의 층수로 만들어지게 된다. 실제 구조용 복합재료 제작되는 경우는 10개 이상 100개 미만 층으로 구성된 그래핀이 사용된다. 따라서 Cu 기반 그래핀 나노복합재료의 기계적 강도를 일정한 성능으로 유지하고, 결합이 제품의 치명적인 성능저하로 이어지지 않도록 그래핀의 층수를 고려하여야 한다.

Kim 등⁷⁾은 금속과 그래핀을 교대로 쌓아 1.5 및 4.0 GPa를 갖는 고강도 복합재료를 제작하여 고에너지 양성자로 결합을 생성한 후 공기와 진공 상태에서 발생하는 변화를 연구하였고, Wang 등⁸⁾은 그래핀을 분말형태로 보강하여 인장강도가 154에서 249 MPa로 강화되는 것을 확인하였다. Dan 등⁹⁾은 화학적 센서로서의 그래핀의 특성을 연구하기 위하여 그래핀 표면의 구조적인 결합이 분자와의 결합에 어떤 영향을 미치는지 연구한 바 있다.

그러나 대부분의 연구들은 기계적 성능에 있어서 최종 그래핀 복합재의 강도적인 성능의 향상에 초점을 맞추었고, 결합의 평가에 있어서는 화학적으로 그래핀 시료를 준비하는 과정에서 분자들과의 결합이 얼마나 활동적으로 이루어지는 지

에 초점을 맞추어 논의되어 왔다. 따라서 Cu 기반 그래핀 나노복합재료에서 발생된 결합의 파괴거동에 대한 평가는 안전하고 실용적인 사용을 위하여 필연적으로 연구의 필요성이 제기된다.

저자들은 단일 그래핀에 발생한 결합이 응력에 미치는 영향을 평가한 바 있다.¹⁰⁾ 이 해석은 다층으로 적층된 Cu 기반 그래핀 나노복합재료에 존재하는 결합이 기계적 특성과 파괴거동에 미치는 영향을 평가하기 위하여 수행되었다.

해석은 나노재료인 그래핀을 구현하여 정확하고 정밀한 평가를 수행하기 위하여 미시적 차원의 물리현상을 분석하기 위한 분자동역학적 평가 방법(Molecular Dynamics Simulation: MDS)을 사용하였다. Alian 등¹¹⁾은 MDS를 이행하여 다층 고분자 나노 복합재에서 그래핀의 강화 효과에 대하여 연구하였으며, He 등¹²⁾도 온도와 관련하여 MDS를 이용하여 그래핀/구리 복합재의 기계적 특성을 연구하였다. 이 해석에서는 MDS 프로그램으로 LAMMPS(Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)¹³⁾를 사용하였다.

2. MDS 해석방법 및 모델링

2.1 분자동역학(Molecular Dynamics Simulation: MDS)

분자동역학적 평가방법은 재료의 거동을 원자/분자 단위로 관찰할 수 있는 평가 방법으로 시간에 따라 변화하는 원자 혹은 분자의 움직임을 반복적으로 계산한다. MDS를 사용하면 그래핀과 같은 나노소재의 물성을 재현하여 원자 간의 결합과 파괴로 인해 생성되는 재료의 상호작용을 파악할 수 있다. 또한 나노스케일에서 원자 혹은 분자의 거동을 개별적으로 관찰하는 데 효과적이다¹⁴⁾. 기본적으로 MDS에서는 재료의 상호작용을 계산해주는 함수로 나타낸 퍼텐셜(potential)을 설정하여 계산의 정확도를 결정한다. 이 해석에서는 그래핀과 같은 공유결합소재에 적합한 Tersoff 퍼텐셜¹⁵⁾과, 구리와 같은 금속 소재에 적합한 EAM(Embedded Atom Method)의 업그레이드 퍼텐셜인

EAM/fs 퍼텐셜¹⁶⁾을 설정하여 Cu기반 그래핀 나노 복합재료의 해석을 수행하였다. 사용된 퍼텐셜로 Cu 기반 그래핀 나노복합재료의 평가에 사용된 응력텐서 계산식은 다음 식 (1), (2)와 같다.

$$S_{ab} = -mv_a v_b - W_{ab} \quad (1)$$

$$W_{ab} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N_p} (r_{1_a} F_{1_b} + r_{2_a} F_{2_b}) + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N_b} (r_{1_a} F_{1_b} + r_{2_a} F_{2_b}) + \frac{1}{3} \sum_{n=1}^{N_a} (r_{1_a} F_{1_b} + r_{2_a} F_{2_b}) + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{N_d} (r_{1_a} F_{1_b} + r_{2_a} F_{2_b} + r_{3_a} F_{3_b} + r_{4_a} F_{4_b}) + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{N_i} (r_{1_a} F_{1_b} + r_{2_a} F_{2_b} + r_{3_a} F_{3_b} + r_{4_a} F_{4_b}) + K_{space} (r_{1_a}, F_{i_b}) + \sum_{n=1}^{N_f} r_i \quad (2)$$

식 (1)은 응력텐서 식으로, a, b 는 텐서 구성 요소에서 발생할 수 있는 값 x, y, z 이다. 첫 번째 항은 운동에너지 기여도를 의미하며, m 은 부피(체적), v 는 밀도이다. 두 번째 항은 Virial 기여도를 의미한다. 총 7가지 기여도가 있으며, 이는 식 (2)에 나타난다. 식 (1), (2)에서 r_1, r_2 는 원자 쌍별 상호작용에서의 두 원자의 위치이고, F_1, F_2 는 원자 쌍별 상호작용에서의 두 원자의 힘이다. n 은 반복주기이며 시간에 따라 변화하는 원자의 거동을 반복적으로 계산함을 의미하고, N_p, N_b 등으로 표기된다. N_p 는 원자와 이웃한 쌍별 에너지 기여도, N_b 는 원자의 결합과 관련한 에너지 기여도, N_a 는 원자의 각도에 관한 에너지 기여도, N_d 는 원자의 이면체(dihedral)에 관한 에너지 기여도, N_i 는 원자의 부적절한 상호작용과 관련한 에너지 기여도, N_f 는 원자 내부 구속력 관련 에너지 기여도이다. K_{space} 는 장거리 쿨롱 상호작용을 계산하는 명령어로 표기된 것이며, 이와 관련된 에너지 기여도이다.¹⁷⁻²⁰⁾

2.2 MDS 해석 모델

모델의 구성은 Fig. 1에 나타난 것과 같이 갈색으로 표시된 Cu 분자(원자)를 기지(matrix)로 하고, 회색의 그래핀 분자 층이 샌드위치 형태로 적층되어 있는 형상이다. 모델링 규격은 20.61×11.94×7.46 nm³이고, 균열 결함이 복합체에 미치는 영향을 평가하기 위하여 해석 조건에 따라 총 4가지 해석모델로 구분된다. 이 해석은 그래핀에 대하여서는 지그재그 방향의 균열결함만 대상으로 하였다. Fig. 1에서 ND는 결함이 존재하지 않는 Cu 기반 그래핀 복합재 모델, GD는 그래핀에 결함이 존재하는 모델, CD는 Cu에 결함이 존재하는 모델, CT는 Cu에 두께 방향으로 결함이 존재하는 모델이다. 이때, 구체적인 해석 케이스로 삽입되는 결함의 방향은 그래핀의 이방성을 고려하여 제조과정에서 발생하기 쉬운 지그재그와 Cu에서는 압축어방향으로도 각각 삽입되었다.

해석에 구체적으로 삽입된 결함의 형태는 다음과 같다. GD는 그래핀 층에 가로 9.2~11.2, 세로 5.4~5.9, 높이 4.8~5.3 nm 위치로 34개의 원자 결함이 삽입되었다. CD는 Cu 층에 가로 9.2~11.2, 세로 5.4~5.9, 높이 6.2~6.4 nm 위치로 15개의 원자 결함이 삽입되었다. CT는 Cu 층에 가로 10.2~10.5, 세로 5.4~5.9, 높이 5.2~7.2 nm 위치로 33개

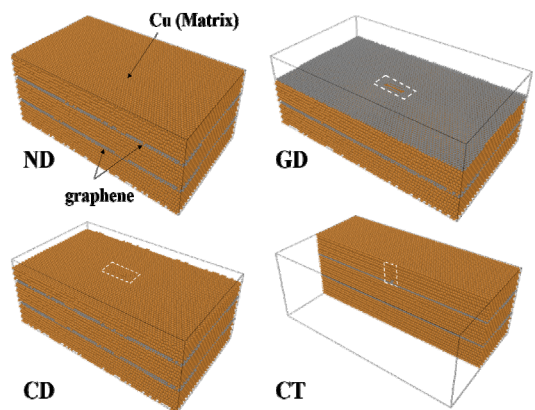


Fig. 1 Cu-based graphene composites modeling (defect type ND, GD, CD, CT)

의 원자 결합이 삽입되었다.

인장 경계조건은 모델의 x 축 양 끝단 0.6 nm를 몰림점으로 설정하였다. 인장속도는 0.17 nm/ps로 x 축 방향을 기준으로 양 끝단이 인장되는 형태이다.

3. 결과 및 고찰

3.1 균열 결함 위치에 따른 영향

Fig. 2는 결함이 Cu 기반 그래핀 복합재의 강도에 미치는 영향을 평가하기 위하여 결함의 위치에 따라 구분된 ND, GD, CD를 지그재그 방향으로 인장한 해석결과이다.

세 해석결과는 공통적으로 완전 파단되기 전까지 두 위치에서 응력감소가 급격히 발생되었다. 첫 번째 구리의 파단이 먼저 시작되었고, 일정 응력감소지점인 변형률 $\epsilon = 0.1$ 에서 응력이 감소한 후 정체구간을 보이다 금속 가공경화현상과 유사하게 다시 급상승한 후 완전 파단하는 양상이 나타났다. 이러한 응력의 정체 현상은 초기 균열의 진전 후 그래핀이 완전 파단되기 전까지로 판별되었다.

변형률 $\epsilon = 0.1$ 에서 응력값은 결함이 없는 ND에서는 19.5 GPa, 그래핀에 균열결함이 있는 GD는 19.69 GPa, Cu에 균열결함이 있는 CD는 19.43 GPa로 거의 유사한 값으로 나타났다. 이것은 균열 결함의 유무는 초기균열진전 전까지는 재료거동에 영향을 미치지 않음을 나타낸다. 그러나 이후 그래핀에 결함이 있는 GD의 경우는 ND 및 CD에 비하여 약 21.7% 더 응력이 급감소하여 약 10.29 GPa의 응력으로 변형률 $\epsilon = 0.36$ 까지 유지된 후 최종파단하였다. 이것은 그래핀의 결함은 Cu 기반 그래핀 복합재 모델에서의 강도 저하에 영향을 미치는 재료임을 판단할 수 있다.

Cu에 결함이 있는 CD가 결함이 없는 ND와 비교하여 유사한 응력-변형률 관계가 나타나는 것은 Cu에 존재하는 결함은 본 연구에서 설정한 크기로는 전체 복합재의 강도적 성능저하에 기여하지 않는 것으로 판단할 수 있다.

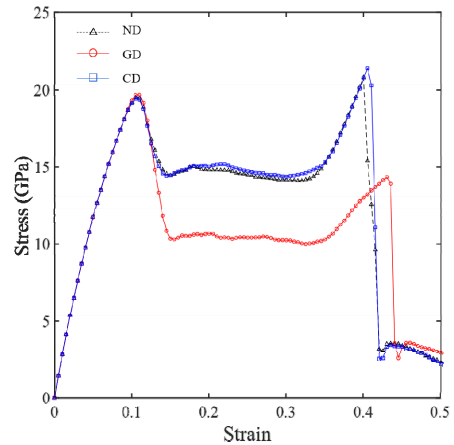


Fig. 2 The relationship of stress-strain according to the crack defects position

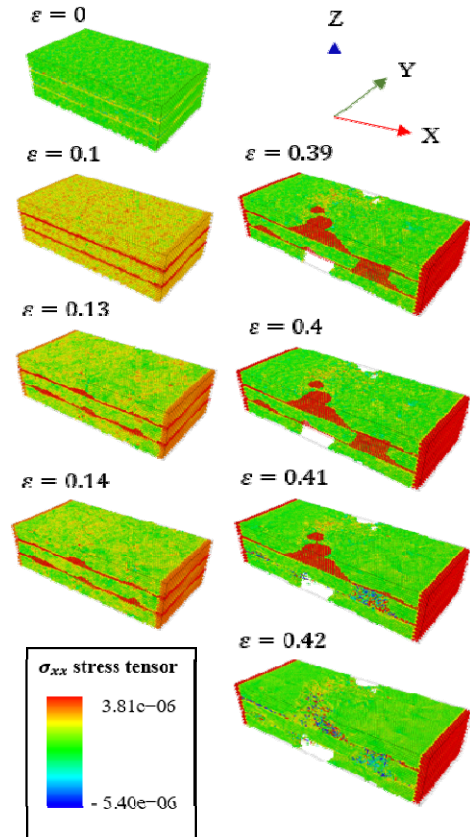


Fig. 3 The fracture behavior of Cu-based graphene without defects

Fig. 3은 결함이 없는 Cu 기반 그래핀 복합재 ND의 파단양상을 등고선으로 나타내고 있다. 등고선은 응력 σ_{xx} 를 표시하고 있으며, 이때 최대 3.81 MPa에서 최소 -5.40 MPa의 응력이 계산되었다. 각 파단양상은 타 모델과의 비교를 위하여 변형이 없는 변형률 $\epsilon = 0$ 을 기준으로 균열개시 시점의 0.1에서 0.14까지, 두 번째 응력상승 시점의 0.39에서 0.42 파단까지의 양상을 나타내었다. $\epsilon = 0.1$ 에서는 등고선으로 확인하는 바와 같이, Cu보다 그래핀에 응력이 집중됨을 알 수 있다. 이후, Cu 층에서 부분적인 박리가 시작되는데 이러한 현상은 아래 Fig. 4에 자세히 나타내었다. Fig. 4의 a와 같이 먼저 Cu 층에서 부분적인 파단이 발생한다. 이후 Cu의 균열이 진전되며 응력변형률 선도에서 확인한 것과 같이 응력의 변화는 미미하나 변형은 계속 진행되다가 $\epsilon = 0.39$ 부터는 Fig. 4의 b와 같이 Cu 층의 전면 파단이 진행되었고,

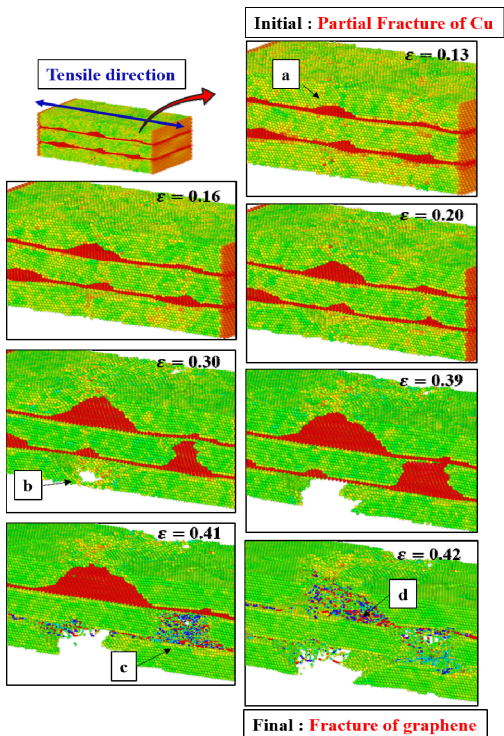


Fig. 4 Cu-based graphene without defects model detail behaviors

Fig. 4의 c와 같이 $\epsilon = 0.41$ 에서 그래핀 하단 층까지 균열결합이 진전하였다. 이후 Fig. 4의 d와 같이 $\epsilon = 0.42$ 에서 그래핀 상단 층에서 그래핀 층의 결합이 완전히 깨졌다.

이러한 파단양상을 통해 응력 변형률 선도에서 고찰한 바와 같이 그래핀 층에 응력이 집중됨에도 불구하고 그래핀의 강도 특성 때문에 Cu 층에서 박리부터 파단으로 이어지는 현상이 먼저 발생함을 확인하였다. 또한 두 번째 응력상승점이 초기 최댓값보다 높은 이유는 Cu의 파단이 먼저 발생하면서 그래핀 층이 응력을 담당하며 모델을 지지했기 때문으로 사료된다.

Fig. 5는 그래핀 층에 지그재그 결함이 있는 Cu 기반 그래핀 복합재 GD의 파단양상을 응력 σ_{xx}

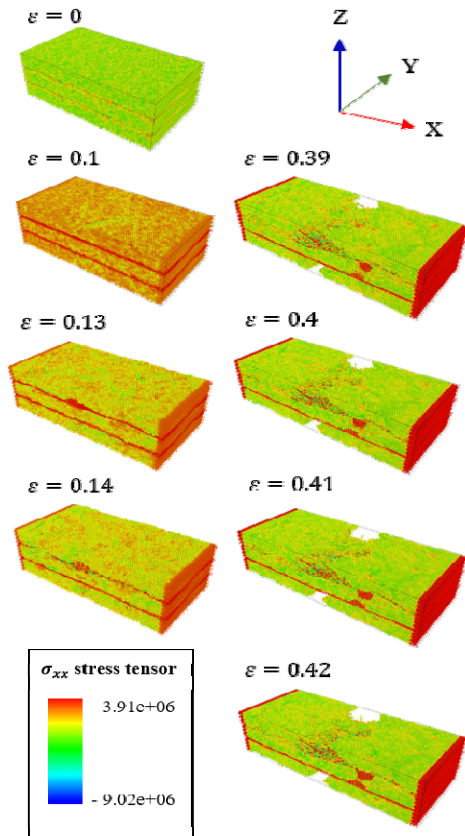


Fig. 5 The fracture behavior of Cu-based graphene composites with a zigzag defect in the graphene (GD)

등고선으로 최대 3.91 MPa에서 최소 -9.02 MPa에서 나타내었다. $\epsilon = 0.1$ 에서 모델 ND보다 Cu 층에 전체적으로 고응력부분이 나타나며, 그래핀 층의 지그재그 결함으로 인해 응력이 Cu 층에도 담당되었음을 알 수 있다. 하지만 모델 GD 역시 모델 ND처럼 Cu 층에서 먼저 박리가 시작되었다. 이후 $\epsilon = 0.13$ 에서 그래핀 층의 결함으로 인해 결함이 삽입된 그래핀 상단부의 파단이 발생하였다. 파단양상을 통해 그래핀 층 발생결함은 Cu 층에 하중 부담을 분배하나, 여전히 응력은 그래핀 층에 집중됨을 알 수 있다. 하지만 Cu 층이 완전히 파단되기 전 결함으로 인해 결함이 삽입된 그래핀 상단부가 파단하면 응력의 저하가 발생하고, 파단되지 않은 그래핀 하단부가 하중을 일부 지지하므로 전체 모델의 완전 파단은 결함이 없는 모델 ND보다 더 큰 변형률에서 발생하였다.

Fig. 6은 GD의 이러한 파단양상을 자세히 보여준다. Fig. 6의 a와 같이 먼저 Cu 층에서 부분적인

파단이 발생한 후 Cu의 균열이 진전된다. 이후 결함이 없는 ND와 달리, 그래핀 상단부에 삽입된 결함으로 인해 Fig. 6의 b와 같이 $\epsilon = 0.13$ 에서 그래핀의 파단이 시작되고, $\epsilon = 0.14$ 에서 그래핀 상단층에서 그래핀 층의 결함이 완전히 깨졌다. 이로 인해 응력변형률 선도에서 확인한 것과 같이 ND보다 낮은 응력에서 응력이 변화는 미미하나 변형은 계속 진행되었다. $\epsilon = 0.39$ 부터는 Fig. 5의 c와 같이 Cu 층의 전면 파단이 진행된 후 Fig. 4의 d와 같이 $\epsilon = 0.44$ 에서 그래핀 상단 층에서 그래핀 층의 결함이 완전히 깨졌다.

이러한 파단양상을 통해 응력 변형률 선도에서 고찰한 바와 같이 그래핀 층에 응력이 집중됨에도 불구하고 그래핀의 강도 특성 때문에 Cu 층에서 박리부터 파단으로 이어지는 현상이 먼저 발생함을 확인하였다. 하지만 그래핀 층에 삽입된 결함으로 인해 첫 번째 응력상승점 이후 낮은 응력에서 변형이 진행되었고, 균열결함이 삽입되지 않은 그래핀 하단부의 결함이 깨지고 완전히 파단되었다. GD의 두 번째 응력상승점이 ND보다 낮은 이유는 Cu 층이 완전히 파단되기 이전에 결함으로 인해 그래핀의 상단부의 결함이 깨지면서 결함이 깨지지 않은 그래핀 하단 층만이 응력을 담당하며 모델을 지지했기 때문으로 사료된다.

Fig. 7는 Cu 층에 지그재그 결함이 있는 Cu 기반 그래핀 복합재 CD의 파단양상을 보여준다. ND, GD와 유사하게 응력 σ_{xx} 는 최대 4.39 MPa에서 최소 -4.95 MPa 범위에 있다. CD의 파단양상에서는 응력이 급감소하는 $\epsilon = 0.1$ 에서 Cu 층에 응력 부담이 가장 적게 분포되었음을 알 수 있다. 박리의 시작 역시 Cu 층에서 먼저 발생되었고, 두 번째 변곡점인 $\epsilon = 0.39$ 부터는 Cu 층이 완전히 파단하였으나, 그래핀 층은 상단부, 하단부 모두 파단되지 않았다. 이후 $\epsilon = 0.42$ 에서 그래핀 층의 완전 파단이 발생하였다. 이를 통해 Cu 층의 결함은 전체 복합재 모델의 응력 저하에 영향을 미치지 않고, 결함이 존재하지 않는 ND 모델과 유사한 응력-변형률 선도를 보임을 알 수 있다.

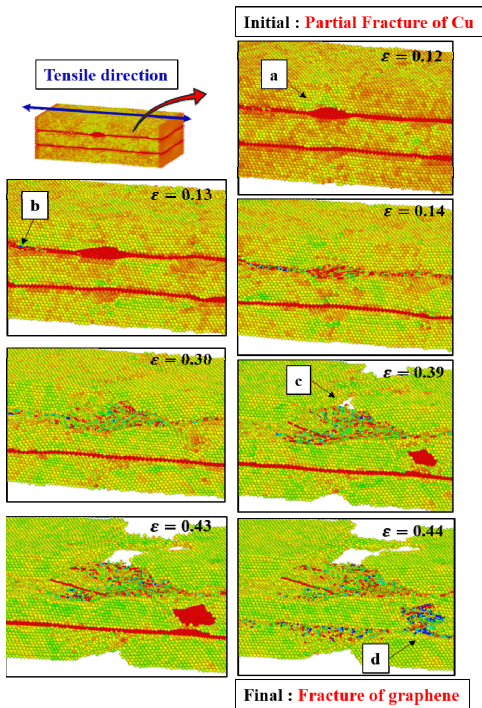


Fig. 6 Graphene x (zigzag) defect model detail behaviors

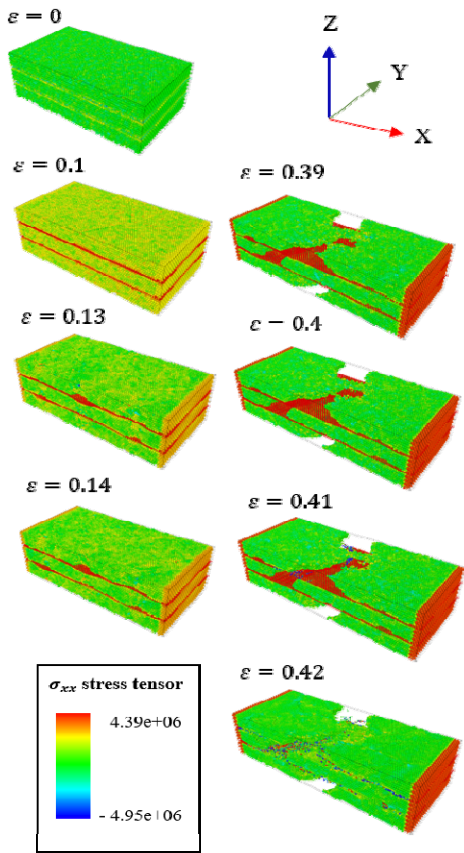


Fig. 7 The fracture behavior of Cu-based graphene composites with a zigzag defect in the Cu (CD)

Fig. 8은 CD의 이러한 파단양상을 자세히 보여 준다. Fig. 8의 a와 같이 먼저 Cu 층에서 부분적인 파단이 발생한 후 Cu의 균열이 진전된다. 이후 계속적으로 Cu 층의 전면 파단이 진행되며, Fig. 8의 b와 같이 $\epsilon = 0.33$ 에서 Cu 중간층이 완전히 파단 된다. 이때 그래핀 층의 결합은 여전히 유지된다. 이로 인해 응력변형을 선도에서 확인한 것과 같이 ND와 GD보다 높은 응력에서 응력의 변화는 미미하나 변형은 계속 진행되었다. $\epsilon = 0.40$ 부터는 Cu 상단층의 전면 파단이 진행된 후 Fig. 8의 c와 같이 $\epsilon = 0.41$ 에서 그래핀 상단층에서 그래핀 층의 결합이 깨지기 시작한다. 이후 Fig. 8의 $\epsilon = 0.41$ 과 같이 그래핀의 결합이 완전히 깨졌다.

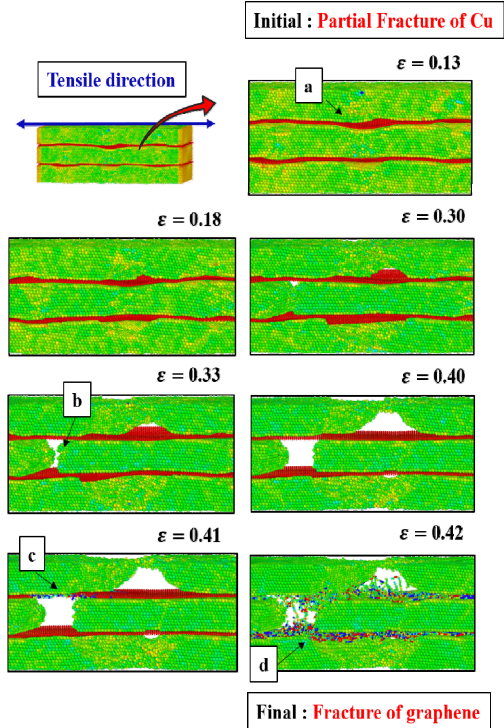


Fig. 8 Cu x(zigzag) defect model detail behaviors

이러한 파단양상을 통해 응력 변형을 선도에서 고찰한 바와 같이 그래핀 층에 응력이 집중됨에도 불구하고 Cu 층에 삽입된 결합으로 인해 Cu 층에서 박리부터 파단으로 이어지는 현상이 먼저 발생함을 확인하였다. 또한 Cu 층의 파단이 진행되는 동안 그래핀 층의 결합이 유지되어 첫 번째 응력상승점 이후 높은 응력에서 변형이 진행되었음을 판단할 수 있다. 그리고 Cu 층이 완전 파단 될 때 균열결합이 삽입되지 않은 그래핀 상단부와 하단부 모두 응력을 담당하며 모델을 지지했기 때문에 CD의 두 번째 응력상승점이 ND보다도 다소 높으며 GD보다 높게 나왔음을 판단할 수 있다. 이는 본 연구에서 설정한 크기의 결합이 그래핀 층에 존재할 때는 전체 복합체의 강도적 성능저하에 기여하나, Cu 층에 존재할 때는 전체 복합체의 강도적 성능저하에 기여하지 않는 것으로 판단할 수 있으며, 이를 3.2에서 좀 더 자세히 고찰하였다.

3.2 구리 층의 결함 위치에 따른 영향

Fig. 9는 Cu 기반 그래핀 복합재료의 강도에 Cu가 미치는 영향의 기여도를 평가하기 위하여 Cu 층 내 결함의 위치가 분별된 CD, CT를 인장해석한 결과이다.

응력 변형을 관계는 Cu 층 내 결함의 방향(지그재그 및 압채어)에 관계없이 ND, GD와 유사한 경향을 나타내었다. CT의 경우에서도 응력감소지점에서 Cu의 파단이 시작되었고, 정체구간에서 CD와 강도값의 차이는 나타났으나 다시 상승하여 완전 파단하는 양상은 동일하다. 강도 차이는 Cu에 두께방향(압채어)으로 결함이 존재하는 CT가 Cu에 지그재그방향으로 결함이 존재하는 CD보다 낮으며, 변형률 0.15에서 0.34까지는 약 13.15 GPa에서 14.93 GPa의 강도를 유지하여 CD와는 0.38 GPa에서 1.22 GPa 차이를 나타내었다. 완전파단은 변형률 0.4인 응력 21.36 GPa에서 급속히 나타났다.

Fig. 10은 Cu 층에 두께방향 결함이 있는 CT의 파단양상을 등고선으로 나타내었다. 등고선은 응력 σ_{xx} 을 표시하고 있으며, 이때 최대 3.75 MPa에서 최소 -4.94 MPa의 응력이 계산되었다.

각 파단양상은 타 모델과의 비교를 위하여 변형이 없는 변형률 $\epsilon = 0$ 을 기준으로 균열개시 시

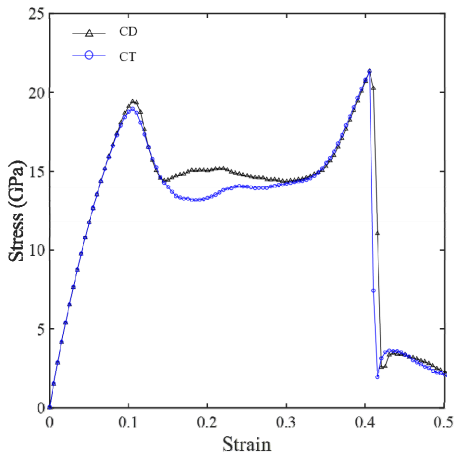


Fig. 9 Graphene x (zigzag) defect graphene/Cu composites

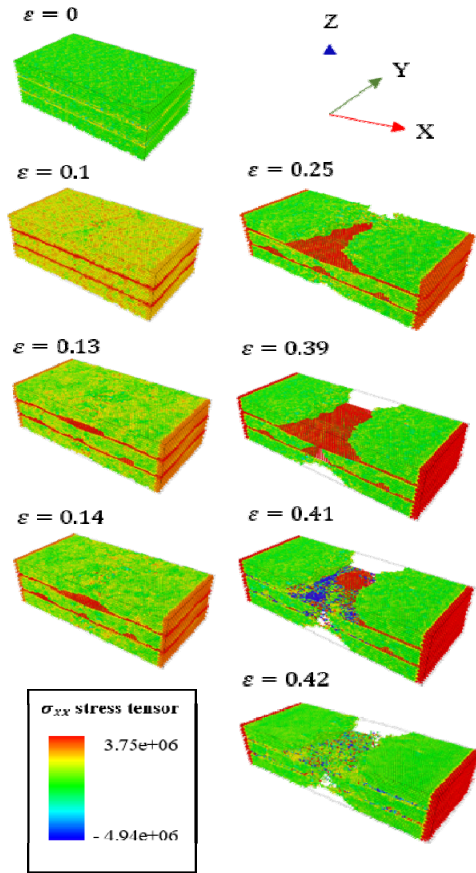


Fig. 10 The fracture behavior of Cu-based graphene with z-direction (armchair) defect in the Cu layer (CT)

시점의 0.1에서 0.25까지, 두 번째 응력상승 시점의 0.39에서 0.42 파단까지의 양상을 나타내었다.

$\epsilon = 0.1$ 에서는 등고선으로 확인하는 바와 같이, Cu보다 그래핀에 응력에 집중됨을 알 수 있다. 이후, Cu 층에서 부분적인 박리가 시작되는데 이러한 현상은 Fig. 11에 자세히 나타내었다.

Fig. 11의 a와 같이 CT 역시 먼저 Cu 층에서 부분적인 파단이 발생한다. 이후 Cu의 균열이 진전되며 응력변형을 선도에서 확인한 것과 같은 응력에 변화는 미미하나 변형은 계속 진행되고, Fig. 11의 b처럼 $\epsilon = 0.29$ 에서 Cu 층의 전면파단이 진행되었고, 이때 그래핀 층은 CD와 마찬가지로 결함이 유지되어 그래핀 층이 응력을 집중됨을 알

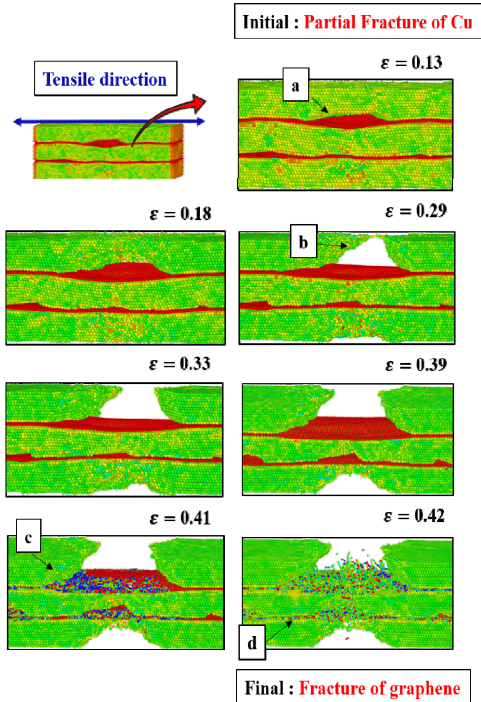


Fig. 11 Cu z-direction (armchair) defect model detail behaviors

수 있다. 이후 Fig. 11의 c와 같이 $\epsilon = 0.41$ 에서 그래핀 층이 결함이 깨지기 시작했고, $\epsilon = 0.42$ 에서 그래핀 층의 결함이 완전히 깨졌다.

이러한 파단양상을 통해 응력 변형률 선도에서 고찰한 바와 같이 동일한 재료 Cu 층에 삽입되는 결함의 형태가 달라도, 응력은 그래핀 층에 집중되며, Cu 층에 삽입된 결함 때문에 Cu 층의 전면 파단이 그래핀 층의 결함이 깨지는 현상보다 선행됨을 확인하였다. 하지만 Cu 층의 파단은 전체 복합재 재료 파단의 진행에 기여하지 않음을 응력 변형률 선도에서 확인할 수 있다. 이는 응력변형률 선도에서, 첫 번째, 두 번째 변곡점의 응력값의 차이는 미미하였으나, 하중의 지지구간에서 응력값의 차이가 나타났던 현상을 설명할 수 있다.

4. 결 론

다층으로 적층된 Cu 기반 그래핀 나노복합재료에 존재하는 결함이 기계적 특성과 파괴거동에

미치는 영향을 평가하기 위하여 수행된 MDS 해석으로 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) $20.61 \times 11.94 \times 7.46 \text{ nm}^3$ 규격의 Cu 기반 그래핀 나노복합재에서, 응력은 그래핀 층에 집중되고, 전체 복합재 성능 저하로 이어지는 강도에 영향을 미치는 재료는 그래핀으로 나타났다.

2) 결함이 그래핀 층에서 발생하는 경우, 14.35 GPa로 가장 낮은 파단 강도가 발생하여 파단에 가장 취약하였다.

3) 결함이 Cu 층에서 발생하는 경우, 결함의 형태가 강도에 미치는 영향은 없었으며, 파괴가 발생하는 변형률에 영향을 미쳤다.

4) Cu 기반 그래핀 나노복합재에서 그래핀의 균열은 전체 나노 복합재의 강도적인 성능향상에 영향을 미치고, Cu 층의 균열은 전체 나노 복합재의 변형 정도에 영향을 미치는 것으로 나타났다.

해석 결과는 Cu 기반 그래핀 나노복합재의 강도적인 성능향상을 위한 연구에 유용하게 사용될 것으로 사료된다.

후 기

이 논문은 부경대학교 자율창의학술연구비 (2019년)에 의하여 연구되었음.

Author contributions

O. H. Kwon; Conceptualization, Supervision and Writing-review & editing. W. R. Park; Project administration and Visualization. S. M. Kim; Investigation, Writing-original draft, Data curation and Visualization.

References

1. W. B. Choi and J. W. Lee, 2012, "Graphene Synthesis and Applications", CRC Press, Boca Raton.
2. L. Rizzi, A. Zienert, J. Schuster, M. Kohne and S. E. Schulz, 2018, "Electrical Conductivity

- Modeling of Graphene-based Conductor Materials", *ACS Appl. Mater. Interfaces*, Vol. 10, No. 49, pp. 43088-43094. (DOI:10.1021/acsami.8b16361)
3. S. J. Kim, D. H. Shin, Y. S. Choi, H. Rho, M. Park, B. J. Moon, Y. Kim, S. K. Lee, D. S. Lee, T. W. Kim, S. H. Lee, K. S. Kim, B. H. Hong and S. Bae, 2018, "Ultrastrong Graphene-Copper Core-Shell Wires for High-Performance Electrical Cables", *ACS Nano*, Vol. 12, pp. 2803-2808. (DOI:10.1021/acs.nano.8b00043)
 4. J. Y. Hyeon, S. H. Choa, K. W. Park and J. H. Sok. 2020, "Graphene Oxide Coated Silver Nanofiber Transparent Conducting Electrode", *Korean Journal of Metals and Materials*, Vol. 58, No. 9, pp. 626-632. (DOI:10.3365/KJMM.2020.58.9.626)
 5. H. Jung and Y. Kang, 2019, "Three-dimensional Nanoporous Graphene-based Materials and Their Applications", *Ceramist*, Vol. 22, No. 3, pp. 242-255. (DOI:10.31613/ceramist.2019.22.3.03)
 6. J. T. Kim, K. C. Kim, Y. J. Yu, D. H. Youn, K. H. Chung, M. H. Choi and C. G. Choi, 2012, "Graphene-based Electronic and Optoelectronic Devices", *Electronics and Telecommunications Trends*, Vol. 27, No. 5, pp. 1-9.
 7. H. Y. Kim and J. H. Kim, 2011, "High-energy Proton Irradiated Few Layer Graphene Devices", *Korean Chem. Eng. Res.*, Vol. 49, No. 3, pp. 297-300. (DOI:10.9713/kcer.2011.49.3.297)
 8. J. Wang, Z. Li, G. Fan, H. Pan, Z. Chen and D. Zhang, 2012, "Reinforcement with Graphene Nanosheets in Aluminum Matrix Composites", *Scripta Materialia*, Vol. 66, pp. 594-597. (DOI:10.1016/j.scriptamat.2012.01.012)
 9. Y. Dan, Y. Lu, N. J. Kybert, Z. Luo and A. T. C. Johnson, 2009, "Intrinsic Response of Graphene Vapor Sensors", *Nano Lett.*, Vol. 9, No. 4, pp. 1472-1475. (DOI:10.1021/nl8033637)
 10. S. M. Kim, W. R. Park and O. H. Kwon, 2021, "Evaluation of the Stress-Strain of Single-Layer Graphene Sheet Including a Crack" *The Korean Society for Power System Engineering*, Vol. 25, No. 2, pp. 14-21. (DOI:10.9726/kspse.2021.25.2.014)
 11. A. R. Alian, M. A. N. Dewapriya and S. A. Meguid, 2017, "Molecular Dynamics Study of the Reinforcement Effect of Graphene in Multilayered Polymer Nanocomposites", *Materials & Design*, Vol. 124, pp. 47-57. (DOI:10.1016/j.matdes.2017.03.052)
 12. Y. He, F. Huang, H. Li, Y. Sui, F. Wei, Q. Meng, W. Yang and J. Qi, 2017, "Tensile Mechanical Properties of Nano-layered Copper/graphene Composite", *Physica E.*, Vol. 87, pp. 233-236. (DOI:10.1016/j.physe.2016.10.044)
 13. S. Plimpton, 1995, "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics", *Journal of Computational Physics*, Vol. 117, pp. 1-19. (DOI:10.1006/jcph.1995.1039)
 14. Y. S. Kang and H. G. Kim, 2008, "Analysis of Stress-Strain Relationship of Nano Structures According to the Size and Crystal Orientation by using the Molecular Dynamics Simulation", *Transactions of the Korean Society Mechanical Engineers - A*, Vol. 32, No. 12, pp. 1047-1054. (DOI:10.3795/KSME-A.2008.32.12.1047)
 15. J. Tersoff, 1988, "New Empirical Approach for the Structure and Energy of Covalent Systems", *Phys. Rev. B*, Vol. 37, No. 12, pp. 6991-7000. (DOI:10.1103/PhysRevB.37.6991)
 16. M. W. Finnis and J. E. Sinclair, 1984, "A Simple Empirical N-body Potential for Transition Metals", *Philosophical Magazine A*, Vol. 50, No. 1, pp. 45-55. (DOI:10.1080/01418618408244210)
 17. D. M. Heyes, 1994, "Pressure Tensor of Partial-Charge and Point-dipole Lattices with Bulk and Surface Geometries", *Physical Review*

- B, Vol. 49, No. 2, pp. 755-764.
(DOI:10.1103/PhysRevB.49.755)
18. T. W. Sirk, S. Moore and E. F. Brown, 2013, "Characteristics of Thermal Conductivity in Classical Water Models", J. Chem. Phys., Vol. 138, p. 064505. (DOI:10.1063/1.4789961)
19. A. P. Thompson, S. J. Plimpton and W. Mattson, 2009, "General Formulation of Pressure and Stress Tensor for Arbitrary Many-body Interaction Potentials under Periodic Boundary Conditions", J. Chem. Phys., Vol. 131, p. 154107. (DOI:10.1063/1.3245303)
20. D. Surblys, H. Matsubara, G. Kikugawa and T. Ohara, 2019, "Application of Atomic Stress to Compute Heat Flux via Molecular Dynamics for Systems with Many-body Interactions", Phys. Rev. E, Vol. 99, No. 5, p. 051301. (DOI:10.1103/PhysRevE.99.051301)