



저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:



저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.



비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.



변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 [이용허락규약\(Legal Code\)](#)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

[Disclaimer](#)

공 학 석 사 학 위 논 문

단층 그래핀판의 초기 균열조건에 따른
파괴거동의 분자동역학적 평가



2020년 2월

부 경 대 학 교 대 학 원

안 전 공 학 과

김 송 미

공 학 석 사 학 위 논 문

단층 그래핀판의 초기 균열조건에 따른
파괴거동의 분자동역학적 평가

지도교수 권 오 현

이 논문을 공학석사 학위논문으로 제출함.

2020년 2월

부 경 대 학 교 대 학 원

안 전 공 학 과

김 송 미

김송미의 공학석사 학위논문을 인준함.

2020년 2월 21일



위 원 장 공학박사 이 의 주 (인)

위 원 공학박사 서 용 윤 (인)

위 원 공학박사 권 오 현 (인)

목 차

1. 서 론	1
1.1 연구 배경	1
1.2 연구 방법 및 목적	5
2. 이론적 배경	7
2.1 그래핀	7
2.1.1 그래핀의 성질	7
2.1.2 그래핀의 제조법	8
2.1.3 그래핀의 균열 및 파괴	11
2.2 분자동역학	13
3. 해석 방법	21
3.1 해석 모델	21
3.2 균열삽입 모델링	23
3.2.1 Model A : 초기균열 위치에 따른 분류	24
3.2.2 Model B : 초기균열 거리에 따른 분류	24
3.2.3 Model C : 초기균열 각도	26

4. 결과 및 고찰	28
4.1 Model A : 초기균열 위치의 결과 및 고찰	28
4.2 Model B : 초기균열 거리의 결과 및 고찰	34
4.3 Model C : 초기균열 각도의 결과 및 고찰	45
5. 결론	53

참고문헌

부록 : The command script used in simulation



Figures

Fig. 1 Graphene flexible display	2
Fig. 2 Graphene ink	2
Fig. 3 Graphene diabete patch	2
Fig. 4 Graphene OLED	2
Fig. 5 Graphene production methods	10
Fig. 6 Graphene shape direction	12
Fig. 7 Schematic of material design simulation according to scale	14
Fig. 8 Graphene sample sheet under tension	22
Fig. 9 Graphene crack shapes	23
Fig. 10 Model A and Model B shapes	25
Fig. 11 Model C shape	27
Fig. 12 Model A crack propagation	31
Fig. 13 Model A Case 1 stress-strain curve	32
Fig. 14 Model A Case 2 stress-strain curve	32
Fig. 15 Model A Case 3 stress-strain curve	33
Fig. 16 Model A Case 4 stress-strain curve	33
Fig. 17 Model B crack propagation	38
Fig. 18 Model B Case 1 stress-strain curve	39

Fig. 19 Model B Case 2 stress-strain curve	39
Fig. 20 Model B Case 3 stress-strain curve	40
Fig. 21 Model B Case 4 stress-strain curve	40
Fig. 22 Model B Case 5 stress-strain curve	41
Fig. 23 Model B Case 6 stress-strain curve	41
Fig. 24 Model B Case 7 stress-strain curve	42
Fig. 25 Model B Case 8 stress-strain curve	42
Fig. 26 Model B Case 9 stress-strain curve	43
Fig. 27 Model B stress and strain variation according to the crack position	44
Fig. 28 Model C Case 1 crack propagation	47
Fig. 29 Model C Case 2 crack propagation	48
Fig. 30 Model C Case 3 crack propagation	49
Fig. 31 Model C Case 4 crack propagation	50
Fig. 32 Model C Case 1 stress-strain curve	51
Fig. 33 Model C Case 2 stress-strain curve	51
Fig. 34 Model C Case 3 stress-strain curve	52
Fig. 35 Model C Case 4 stress-strain curve	52

Tables

Table 1 Properties of graphene	7
Table 2 LAMMPS conditions	22



The Evaluation of Molecular Dynamics of Fracture Behavior according to the
Initial Crack Conditions of a Single Layer Graphene Sheet

Song-Mi Kim

Department of Safety Engineering, Graduate School
Pukyong National University

Abstract

Graphene is an advanced material which is 0.33 nm thin and flexible, and has a strength 200 times higher than steel and a thermal conductivity 10 times higher than copper or aluminium. Due to these characteristics, researches are already underway to utilize and commercialize the excellent properties of graphene to improve the performance of existing materials or products in various fields such as displays, batteries, gas sensors, and wearable devices. However, a thin graphene is more likely to cause cracks in the manufacturing process at various positions, leading to deterioration of the product. For this reason, studies have been conducted to evaluate cracks and defects in graphene, but few studies have been accomplished to evaluate the failure behavior as the change of initial crack conditions, such as the position and shape of the crack. Therefore, this study evaluated molecular fracture behavior of graphene to single layer graphene sheet under various initial crack conditions. The tool of analysis is used LAMMPS, which can analyze atomic and molecular units of microscopic dimensions, such as a graphene. The analysis models were classified into three types according to the position, distance, and angle. As results of the analysis, the initial crack in the single graphene sheet tended to break at the same time as it started to grow, and the model analysis considering the position showed that the fracture strength

of the initial crack located at the upper center was 101 GPa. The results of this study may provide a criterion to help solving problems for the defects and cracks in the manufacturing process to improve the performance and commercialization of graphene.



제 1 장 서 론

1.1 연구 배경

그래핀(graphene)은 탄소 원자가 육각형 형태로써 아주 얇은 한 겹으로 결합한 나노재료이다. 그래핀은 두께가 얇음에도 불구하고 잘 구부러지는 특성을 지니고 있으며 강도와 탄성계수 등 기계적 물성이 우수하다. 또한 전기적 물성 역시 뛰어난 장점을 가지고 있다. 이와 같은 그래핀의 우수한 특성은 이론적으로만 존재하다가, 많은 시도 끝에 기계적 박리법을 통해 실험적으로 흑연에서 한 겹인 그래핀을 추출하는 것에 성공하며 비로소 실 제적인 응용에 대한 관심의 증폭으로 이어지게 되었다¹⁾.

하지만 기계적 박리법은 고품질의 그래핀을 얻을 수 있으나 그래핀 제품 제작을 위한 그래핀의 대량 생산에는 적합하지 않음이 발견되었다. 따라서 대량 생산에 적합한 그래핀 제조법에 대한 연구가 많이 시도되었으며 그 과정에서 화학적 박리법, 에피택셜(epitaxial) 성장법, 화학기상 증착법(chemical vapor deposition) 등이 등장하고 개발되었다.

이상의 제조법들로 제작된 그래핀은 차세대 신소재 제품으로 응용하기 위해 여러 분야에서 매우 주목받는 재료이다. Fig. 1~4와 같이 플렉시블 디스플레이, 투명 전극, 터치 패널, 웨어러블·폴더블 디바이스, 유해·독성가스 감지 센서, 바이오 센서, 이차전지, 연료전지, 배리어 필름, 3D 프린트 잉크 등에서 그래핀을 활용한 제품 응용을 위한 연구가 이미 활발히 진행되고 있다²⁻⁵⁾. 안전 분야에서도 추후 유해·독성가스 감지 센서나 스마트 안전 웨어러블 기기의 성능 향상에 우수한 강점을 보일 것으로 사료된다.



Fig. 1 Graphene flexible display.



Fig. 2 Graphene ink.

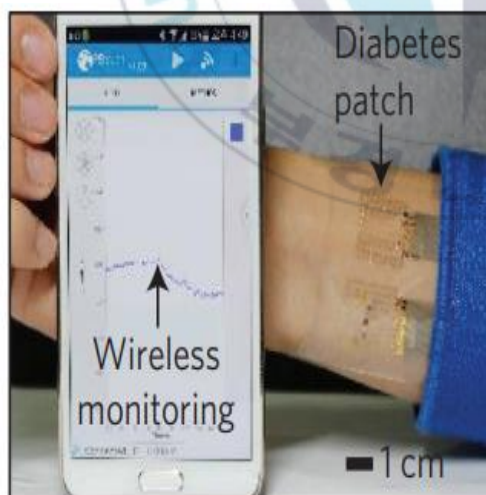


Fig. 3 Graphene diabete patch.



Fig. 4 Graphene OLED.

관련 연구로는 손 등⁶⁾이 그래핀을 그래핀 볼(graphene ball)로 활용하여 기존의 리튬 이온 배터리(lithium-ion batteries)보다 빠른 충전속도 및 높은 에너지 밀도를 갖는 그래핀 배터리를 개발해 전기자동차에 적용하도록 제안한 바 있으며, Kehayias 등⁷⁾은 그래핀 산화물을 이용해 암모니아(NH₃) 등에 빠른 화학적 감지 반응을 보이는 가스 센서를 개발하였다.

이처럼 그래핀의 우수한 성질을 다양한 분야에 적용하려는 노력이 계속되고 있으나 현재 수준에서 그래핀은 제조과정에서 필연적으로 발생하는 균열의 생성과 성장으로 인한 위험성을 내재하고 있다. 이는 상용화를 위해 고품질의 그래핀을 획득하는 제조과정에서 발생하는 결함과 균열 문제의 해결에 관한 연구가 반드시 수행되어야 함을 의미한다.

이러한 이유로 원⁸⁾은 원자 현미경 측정법을 이용해 폴리머 기판에 전사된 그래핀에서 발생한 균열 및 손상에 관한 전기·기계적 거동을 확인하였다. 또한 김⁹⁾은 그래핀 균열 진전에 따른 균열 선단 응집영역 법칙을 구하는 방법을 제시한 바 있다. 국외 연구 동향에선 Wang 등¹⁰⁾이 그래핀 시트에서 재료의 파괴강도에 대한 결함의 영향을 평가하는 연구를 수행하였으며, Zhang 등¹¹⁾은 분자동역학(Molecular dynamics) 시뮬레이션을 통해 중심 균열을 포함한 단층 그래핀의 파괴를 수행해 그래핀의 파괴 인성을 측정하였다. 이처럼 국내외로 그래핀의 균열 및 파괴역학적 관점의 여러 연구가 수행되고 있지만 앞선 연구들은 균열이 시작되는 위치와 형상에 따라 달라지는 파괴거동의 차이를 세밀히 구분하지는 않고 있다.

균열 해석에서는 균열의 시작과 전파 및 진전, 성장, 방향 등의 변수를 고려하는 것이 중요하다. 이러한 이유로 Nguyen 등¹²⁾은 분자동역학 시뮬레이션을 이용해 단층 그래핀의 파괴를 암체어(armchair)와 지그재그 형태로 설명하였으며, 박¹³⁾은 그래핀에서 암체어와 지그재그 형태의 균열으로 산란되는 전자의 특성을 연구하였다. 하지만 이러한 연구 역시 초기균열의

위치, 각도 등에 따라 다양하게 발생할 수 있는 변수를 고려하여 그래핀의 파괴거동과 위험성을 평가하지는 못하였다.

초기균열 변수를 고려한 균열의 파괴거동과 위험성은 분자동역학 시뮬레이션을 통해 평가할 수 있는데, 분자동역학 시뮬레이션은 그래핀과 같은 나노재료의 현상을 일반적인 인장 및 피로시험을 통해 규명하기 어려울 때 원자 수준에서 일어나는 변화를 관찰하고 원자 간의 역학적 관계를 규명하기 적합한 해석 방법이다.

특히 그래핀이 물리·전기·화학적으로 뛰어난 특성을 가지는 것은 원자단위의 배열 구조에 기인하기 때문에 분자동역학을 기반으로 한 분자동역학 시뮬레이션 해석을 사용하면 초기 균열의 변수를 고려한 파괴현상을 규명할 수 있다. 이러한 이유로 실제 다양한 변수와 조건을 대입하여 그래핀을 해석적으로 연구한 결과도 계속하여 보고되고 있다.

분자동역학 시뮬레이션에 관한 연구로는 김 등¹⁴⁾이 분자동역학 방법 중 하나인 EAM(Embedded Atom Method)를 사용하여 팔라듐에 대한 수소저장 및 팽창거동에 대한 해석을 수행한 바 있다. EAM은 금속에서 수소에 의한 파괴 등을 계산할 수 있는 수치해석 방법으로 해당 연구에서는 팔라듐 시험편의 실험결과를 EAM을 통한 해석 결과와 비교해 분자동역학 수치해석의 신뢰성을 입증하였다. 또한 박 등¹⁵⁾은 그래핀이 온도에 따라 기계적 물성치가 어떻게 변하는지 분자동역학적 연구를 수행하여 그래핀 패치 중심부의 강도와 탄성계수가 온도가 증가함에 따라 감소한다는 결과를 분자동역학 시뮬레이션으로 규명하였다.

이처럼 분자동역학 시뮬레이션은 이미 여러 재료의 분자단위 해석에 충분히 사용되어 그 신뢰성이 확인된 기법으로 본 연구대상인 그래핀의 분자단위 균열 해석모델과 계산에 가장 적합한 해석방식이다.

1.2 연구 방법 및 목적

본 연구는 그래핀의 모델링과 해석을 분자동역학 시뮬레이션으로 평가하여 그래핀의 우수한 특성과 나노스케일의 정밀한 거동을 재현하였다. 또한 다양한 변수를 고려한 초기균열 조건을 다수 설정하여 분자동역학 시뮬레이션을 수행하였다.

본 연구의 목적은 제조과정에서 발생 가능한 다양한 균열이 그래핀의 품질 안정성에 어떠한 영향을 미치는지 평가하기 위하여 초기균열의 위치 및 거리, 각도에 대한 변수를 고려해 단일 그래핀 시트에 존재하는 균열에 대한 거동을 예측하고 평가하는 것이다. 위치 및 거리, 각도를 변수로 고려한 이유는 그래핀에서 무작위로 발생할 수 있는 다양한 균열 상태에 따른 거동을 변수를 통해 평가하기 위함이다.

먼저 위치를 고려한 그래핀 시트 모델은 해석의 효율성을 위하여 전체 그래핀 시트의 1/4 영역의 모서리에 초기균열을 삽입하여 각각의 케이스에 대한 인장해석을 수행하였다. 이는 해석대상인 그래핀 시트가 대칭구조이기 때문에 가능하다. 두 번째 해석모델은 초기균열이 하중점에서 떨어진 거리를 여러 케이스로 나누어 그래핀 시트에 대한 인장해석을 수행하였다. 마지막 해석모델은 길이방향에 대하여 초기균열의 각도를 달리하여 해석 케이스를 구분한 인장해석을 수행하였다.

이때 분자동역학 해석 도구는 원자·분자 단위의 미시적 차원의 해석이 가능한 LAMMPS(Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)¹⁶⁾를 사용하였다. 해석 결과는 각 모델에 대한 케이스별 응력과 파괴 거동을 고려하여 그래핀 시트의 위험성을 분석하였다.

본 연구에서 얻어진 결과들은 차세대 꿈의 소재로 불리는 그래핀의 제조 과정에서 발생하는 균열에 대한 안정성을 평가하는 기준에 적용할 수 있을

것으로 사료된다. 향후 본 해석연구에서 제시된 초기균열의 변수에 더하여 다양한 그래핀 시트와 균열의 형상에 관한 해석계산이 수행된다면 제조과정뿐만 아니라 사용 중 발생하는 균열까지 고려한 유용한 해석수단으로 사용될 수 있을 것으로 사료된다.



제 2 장 이론적 배경

2.1 그래핀

2.1.1 그래핀의 성질

그래핀 재료의 일반적인 특성은 Table 1과 같다. 그래핀 한 겹의 두께는 0.33 nm로 매우 얇고, 무게는 0.77 mg/m²로 매우 가볍다. 표면적은 2,630 m²/g로 넓고 잘 구부러지는 특성을 지니며 우수한 강도 및 탄성계수를 가지고 있다. 열전도성은 약 4,840~5,300 W·m⁻¹·K⁻¹ 이고, 전기적 특성도 우수하며, 2 nm 두께의 그래핀에서는 95 %의 높은 투과율을 갖고 있다¹⁷⁻¹⁹⁾.

그래핀이 미래의 신소재로 주목받는 이유는 우수한 전기적 특성으로 초고속 반도체에 활용 가능하며, 투명하면서 우수한 신축성과 강도 및 높은 전기전도도로 인하여 플렉시블 디스플레이 및 고효율의 태양전지 등으로 활용할 수 있기 때문이다.

Table 1 Properties of graphene

Type	Unit	Value
Thickness	[nm]	0.33
Weight	[mg/m ²]	0.77
Surface area	[m ² /g]	2,630
Elastic modulus	[TPa]	0.5 ~ 1
Electron Mobility	[cm ² ·V ⁻¹ ·s ⁻¹]	15,000
Resistivity	[Ω·cm]	10 ⁻⁶
Thermal conductivity	[W·m ⁻¹ ·K ⁻¹]	4,840 ~ 5,300
Transmittance	[%]	95 % for 2 nm thick film 70 % for 10 nm thick film

2.1.2 그래핀의 제조법

단층 그래핀은 이론적으로만 존재하다 2004년 Andre Geim, Konstantin Novoselov 등에 의해 실험적으로 처음 발견되었다. 이후 계속된 연구로 인해 현재는 Fig. 5와 같이 기계적, 화학적 박리법과 에피텍셜 성장법, 화학기상 증착법의 여러 제작방법으로 그래핀을 제조할 수 있는 수준까지 이미 올라와 있다.

그래핀의 제조법 중 기계적 박리법은 스카치테이프를 이용해 흑연으로부터 그래핀을 기계적으로 분리하는 방법으로 가장 원초적이지만 결정성이 우수한 고품질의 그래핀을 얻을 수 있다. 전기 전도성이 높아 결함의 발생이 적은 장점을 지닌 제조방법이다. 하지만 상용화 관점에서 대량 생산을 위한 효율이 떨어지는 치명적인 단점을 가진다. 또한 그래핀의 층수 조절이 어렵고, 기타 유기 불순물에 의한 오염의 위험성이 있다.

화학적 박리법은 용액을 통해 산화흑연을 초음파 처리하여 박리한 후 산화·환원의 과정을 거쳐 그래핀을 얻는 방법이다. 즉, 강산을 이용해 흑연을 화학적으로 산화시키고 그래핀 층을 분리하는 방법이다. 화학공정으로 동시에 많은 양을 합성할 수 있어 대량 생산이 가능하기 때문에 기계적 박리법에 비하여 경제적이다. 또한 표면적이 넓어 저장성을 높일 수 있기 때문에 제품의 응용 가능성이 높다. 그러나 환원 후 그래핀에 결함이 발생하기 쉽고, 초음파 처리과정에서 그래핀의 층간분리에 사용되는 산소관능기를 완전히 제거하기 어려운 단점이 있다. 또한 상대적으로 여타 제작방법과 비교하여 고품질의 그래핀을 얻기가 힘들다.

에피텍셜 성장법은 고온의 열처리를 통해 탄소원자에서 그래핀을 생산하는 방법이다. 이렇게 생성된 그래핀은 기계적 박리법의 단점이었던 층수와 성장인자를 조절할 수 있다. 또한 화학적 박리법으로는 어려웠던 고품질의

그래핀을 얻을 수 있다. 하지만 다른 제작방식에 비하여 제작 난도가 높고 비용이 많이 소요되며 제작된 그래핀의 전기적 특성이 좋지 못한 단점이 있다.

화학기상 증착법은 구리나 니켈과 같은 금속촉매 기판에서 탄소원자를 그래핀으로 성장시키는 제작방법이다. 이러한 방법은 에피텍셀 성장법처럼 그래핀의 층수와 성장인자를 조절함과 동시에 대면적·고품질·고순도의 그래핀 생산이 가능하다. 동시에 단층 그래핀의 합성에도 용이하고 성장시킨 그래핀을 다른 기판으로 쉽게 옮길 수가 있기 때문에 현재 그래핀의 제작방식 중에서는 대량 생산이 가능한 최적의 수단으로 가장 주목받고 있는 제작방법이다²⁰⁻²²⁾.



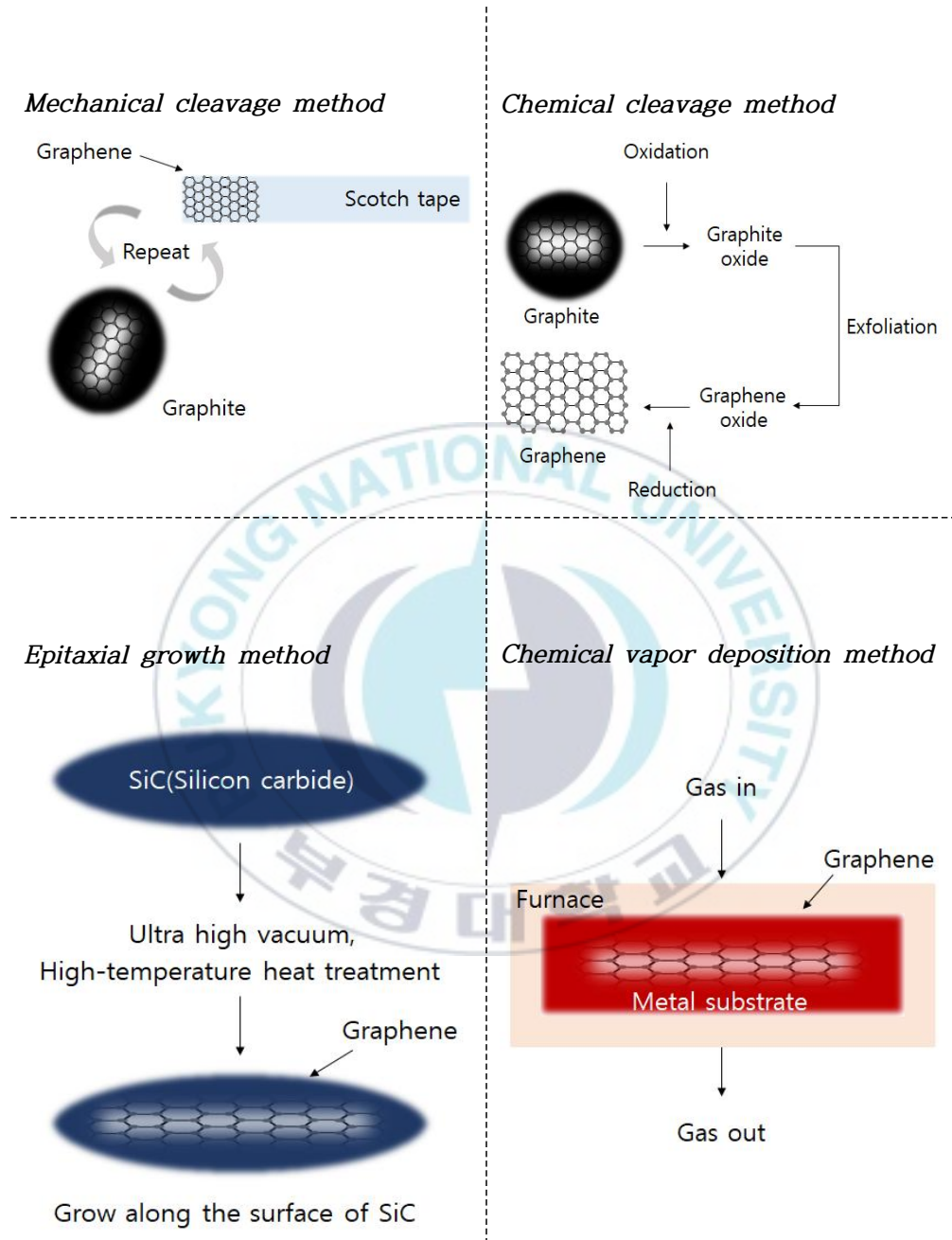


Fig. 5 Graphene production methods.

2.1.3 그래핀의 균열 및 파괴

그래핀에서 발생하는 균열 형태는 압축어 형태와 지그재그 형태로 구분할 수 있다. 압축어 형태는 그래핀에서 원자 4개가 팔걸이의자 모양처럼 이어지는 형태를 뜻하며, 지그재그 형태는 그래핀에서 원자 3개가 지그재그 모양으로 이어지는 형태를 뜻한다. 그래핀 원자구조는 Fig. 6과 같이 육각형의 결합구조를 가지기 때문에 그래핀에서 발생하는 모든 균열형상은 지그재그와 압축어 두 형태로 설명이 가능하다.

Fig. 6 (a)와 같은 원자배열을 갖는 그래핀은 인장력을 받는 상황에서는 압축어 형태의 균열은 가로로 진전하고 지그재그 형태의 균열은 세로로 진전하는 상황에 해당된다. 반면, Fig. 6 (b)의 원자배열을 갖는 그래핀은 인장력을 받는 상황에서는 압축어 형태의 균열은 세로로 진전하고 지그재그 형태의 균열은 가로로 진전하는 상황에 해당된다.

이러한 개념은 그래핀의 원자 배열에 따라 균열 진전방향이 똑같다 하더라도 균열 진전면이나 균열의 전파 형상이 달라질 수 있음을 의미한다. 아울러 그래핀의 균열과 파괴 해석이 왜 나노스케일의 분자동역학 시뮬레이션으로 수행되어야 하는지를 잘 나타내는 개념이다.

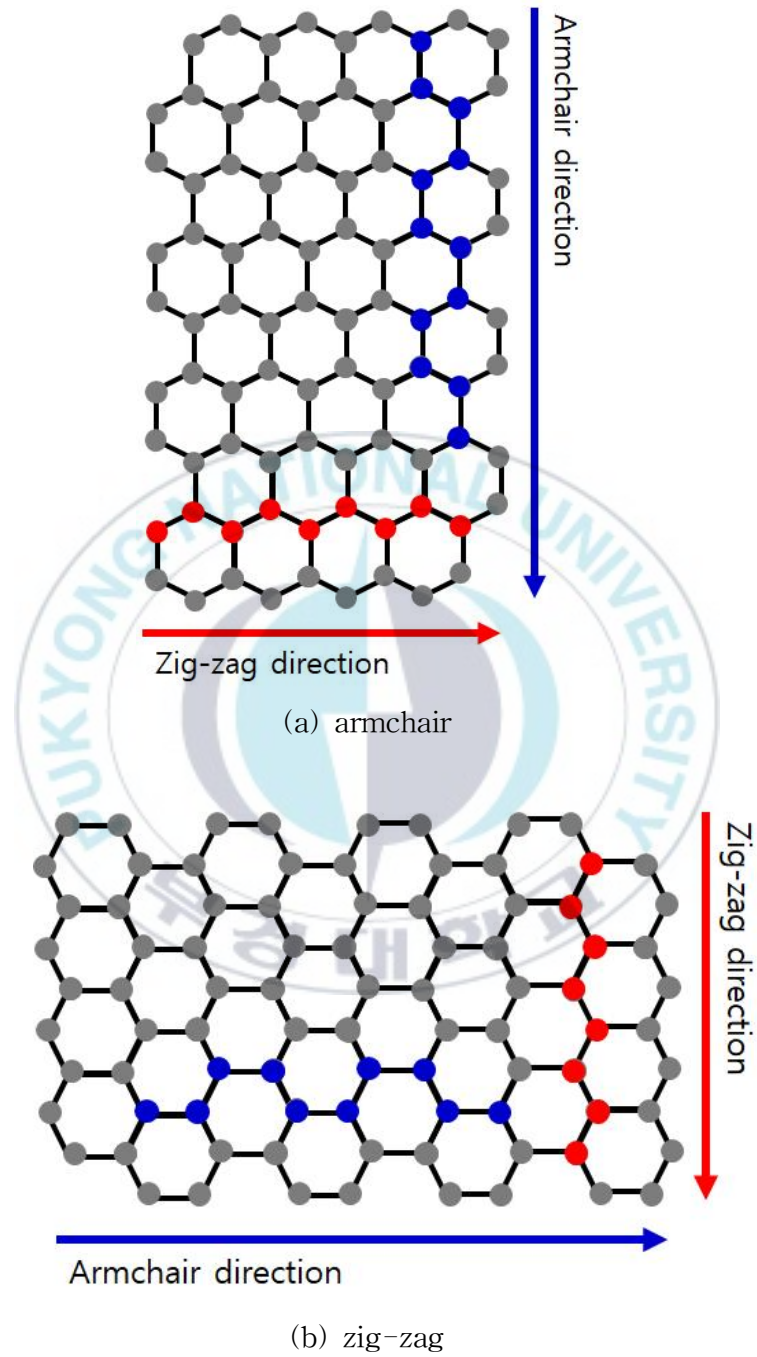


Fig. 6 Graphene shape direction.

2.2 분자동역학

그래핀을 포함한 대부분의 나노소재는 비표면적이 크기 때문에 표면에서 발생하는 현상이 물성에 큰 영향을 미친다. 일반적으로 표면에서 구조가 미세하게 변하면 물성이 크게 변하기 때문에 제어하기가 어려워진다. 이를 해결하기 위한 실험 연구를 진행하는 경우 AFM(Atomic Force Microscopy) 등의 기술로 나노소재를 육안으로 관찰할 수 있지만, 실험 연구에서는 고진공, 극저온 등의 이상적 조건이 필수적이므로 외부 변수의 통제 및 소요비용에서 제약이 발생하고 원자의 동적 거동을 관찰하는 것에 한계가 존재한다.

이러한 한계를 해결하기 위한 방법이 분자동역학이다. 분자동역학을 이용하면 실험적으로 구현하기 어려운 많은 현상을 계산하고, 원자 및 분자의 거동의 관찰로 물성을 제어할 수 있는 방법을 연구할 수 있다. Fig. 7은 재료 설계 시뮬레이션의 개략도이고, x 축은 길이 해석 스케일, y 축은 시간 해석 스케일을 의미한다. 길이에서는 nm, Å (10^{-10} m), 시간은 ns, ps로 해석되는 나노소재의 대표적인 계산방법에는 제일원리계산(first-principles calculation), 몬테카를로(Monte Carlo), 분자동역학이 있다.

제일원리계산은 나노소재의 전자구조를 양자역학적 해석을 통해 계산할 수 있어 원자 단계의 소재 설계를 가능하게 하는 방법이다. 다만 현재로서는 1,000개 이상의 원자를 가진 시스템에서 계산에 소요되는 시간과 비용이 비효율적인 한계를 지니고 있다.

몬테카를로와 분자동역학 방법은 원자나 분자의 거동을 계산할 수 있는 방법으로 흔히 분자 시뮬레이션이라 함이 이 두 방법을 지칭한다. 몬테카를로는 난수(random number)를 이용해 원자 및 분자의 거동을 추적하는 통계학적 방법이다. 이 방법은 모델의 열역학적 평형을 분석하는 데 장점이 있지만, 계(system)의 동역학적 현상을 다루는 데에 적합하지 않다²³⁻²⁵⁾.

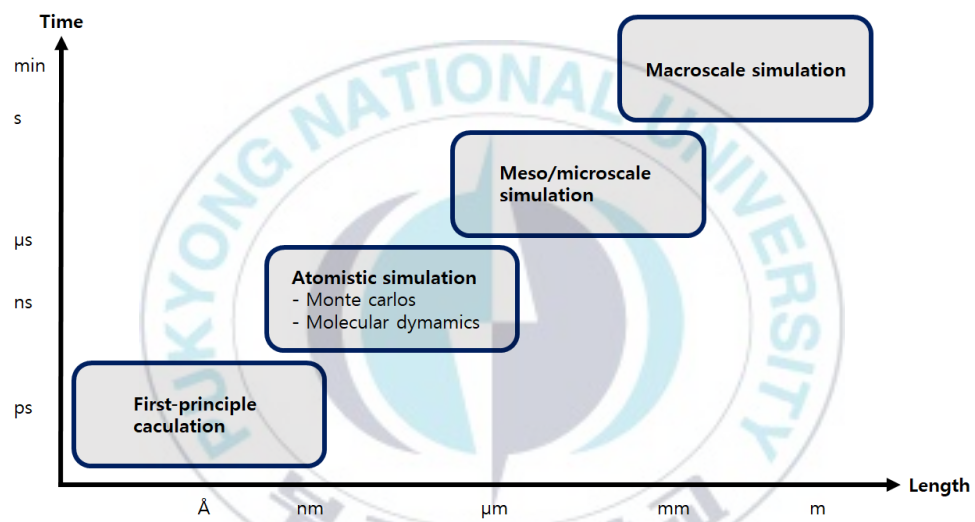


Fig. 7 Schematic of material design simulation according to scale.

반면 분자동역학은 분자들의 운동을 식 (1)²⁶⁾과 같은 Newton의 운동방정식으로 열역학적 평형에도 유용하고 비평형 상태인 계의 동역학적 특성까지 분석할 수 있다. 따라서 원자수가 많거나 시뮬레이션 시간이 긴 경우 분자동역학 방법은 분자들의 운동에 대해 열역학적 평형뿐만 아니라 비평형 상태의 동역학적 특성을 분석할 수 있는 유일한 방법이다. 또한, 수억 개의 원자를 다룰 수 있기 때문에 분자구조 초기의 반응 거동을 살피는 데 매우 유용하다.

$$F_i = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = m_i \frac{dV}{dt} \quad (1)$$

F_i 는 분자 i 의 힘을 나타내고, m_i 는 분자 i 의 질량, r_i 는 분자 i 의 거리, V 는 분자 i 의 속도, t 는 시간을 뜻한다. 식 (1)을 기반으로 원자들 간의 위치와 속도를 계산할 수 있다. 본 연구의 LAMMPS 시뮬레이션에서 분자동역학 계산을 위해서는 반드시 다음의 네 가지 조건이 지정되어야 한다²⁷⁾.

(1) 퍼텐셜

퍼텐셜은 시간에 따른 각 원자의 전개(evolution)와 정적 특성(static properties) 및 동역학적 특성(dynamic properties) 등을 정의하여 원자 간 상호작용을 계산하는 것이다. 대표적인 퍼텐셜에는 LJ(Lennard Jones), Tersoff, AIREBO(Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order) 등²⁸⁻²⁹⁾이 있다. 이 중에서, 그래핀 및 탄소나노튜브의 탄소 간 결합에 가장 일반적으로 사용되는 퍼텐셜은 AIREBO이다. AIREBO는 원자의 생성과 결합 파괴에 대한 공유 결합 시뮬레이션을 할 수 있게 한다. 또한 균열의 시작 여부를 정해주며 결합 형성 및 파괴를 정교하게 계산할 수 있게 해준다.

AIREBO에서 각 항의 매개변수는 LAMMPS에서 뉴턴 제3법칙인 작용-반작용 법칙을 따르게 하는 옵션과 단위를 금속으로 지정하는 옵션을 설정해야 이루어진다. 이때 입자 및 모델유형은 식 (2)³⁰⁾로 표현된다.

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left[E_{ij}^{REBO} + E_{ij}^{LJ} + \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} E_{ijkl}^{TORSION} \right] \quad (2)$$

여기서 E_{ij}^{REBO} 는 원자 사이 결합에 저장된 에너지가 원자 i 와 j 에 대해 주어지는 항이며 식 (3)으로 계산된다.

$$E_{ij}^{REBO} = V_{ij}^R(r_{ij}) + b_{ij} V_{ij}^A(r_{ij}) \quad (3)$$

V_{ij}^R 와 V_{ij}^A 는 원자 i , j 의 유형에 의해 결정되는 반발력과 인력을 뜻하며 r_{ij} 은 두 원자 사이의 거리를 뜻한다. 이때 V_{ij}^R 와 V_{ij}^A 는 오직 r_{ij} 에만 의존한다. 또한, E_{ij}^{REBO} 의 값은 다체(many-body)를 의미하는 항인 b_{ij} 과의 의존성을 통해 i 와 j 의 결합과 유사한 원자의 위치와 화학적 동질성을 결정한다. 다체란 셋 이상 물체의 질량, 초기 위치 및 초기 속도를 통해 이후의 운동상태를 찾는 다체 문제에서 셋 이상의 물체를 가리키는 용어이다.

E_{ij}^{LJ} 는 원자 사이 비결합 상호작용을 고려한 항으로 식 (4)로 표현된다.

$$E_{ij}^{LJ} = S(t_r(r_{ij}))S(t_b(b_{ij}^*))C_{ij}V_{ij}^{LJ}(r_{ij}) + [1 - S(t_r(r_{ij}))]C_{ij}V_{ij}^{LJ}(r_{ij}) \quad (4)$$

$S(t)$ 는 해비사이드 계단 함수(또는 단위 계단 함수)로 표기되는 스위칭 함수이다. $t < 0$ 인 경우는 1, $t > 0$ 인 경우엔 0으로 나타내며 두 값 사이는

보간법 중 3차 스플라인 보간법을 통해 부드럽게 연결한다. $S(t_r(r_{ij}))$ 는 한 쌍의 원자 사이의 거리가 E_{ij}^{LJ} 의 강도에 영향을 미치게 한다. $t_r(r_{ij})$ 는 스케일링 함수로, 헤비사이드 계단 함수인 $S(t)$ 의 영역을 다시 스케일링하게 한다. V_{ij}^{LJ} 는 분산과 분자 간 반발에 대한 상호작용을 의미한다. b_{ij}^* 는 결합 순서를 나타낸다. C_{ij} 는 E_{ij}^{LJ} 이 3 개 이하의 결합으로 연결된 원자 쌍은 비활성화하고, 부분적으로 분리된 결합으로 연결된 원자 쌍은 부분적으로 비활성화하게 하는 일종의 연결 스위치 역할을 한다.

마지막으로 $E_{kijl}^{TORSION}$ 는 총 에너지에서 원자 간 비틀림 상호 작용이 포함된 항으로 식 (5)로 표현된다. 원자 i, j, k, l 에 대해 r 은 원자 간의 거리 w 는 결합의 무게를 의미한다. $V^{TORSION}(\omega_{kijl})$ 는 원자 간 비틀림을 코사인에 대한 멍급수 식 (6)으로 표현된다. ω_{kijl} 는 이면각을 의미한다.

$$E_{kijl}^{TORSION} = w_{ki}(r_{ki})w_{ij}(r_{ij})w_{jl}(r_{jl}) \times V^{TORSION}(\omega_{kijl}) \quad (5)$$

$$V^{TORSION}(\omega_{kijl}) = \frac{256}{405} \epsilon_{kijl} \cos^{10}(\omega_{kijl}/2) - \frac{1}{10} \epsilon_{kijl} \quad (6)$$

종합적으로 AIREBO 퍼텐셜을 사용하면 E_{ij}^{REBO} , E_{ij}^{LJ} , $E_{kijl}^{TORSION}$ 항을 통해 본 연구 해석 대상인 그래핀의 원자 간 결합, 비결합, 비틀림 상호작용을 모두 고려한 계산이 가능하다.

(2) 알고리즘

분자동역학 시뮬레이션의 알고리즘은 시스템 안에 존재하는 모든 입자의 궤적을 반복적으로 긴 시간 계산하는 과정에서 수치적 오차를 최소한으로 줄여 높은 정확도의 결과를 선택하기 위한 방법을 의미한다. LAMMPS에

서 선택할 수 있는 알고리즘에는 Polak-Ribiere 버전 CG(Conjugate Gradient) 알고리즘, Hessian-free Newton 알고리즘, Steepest descent 알고리즘 방법 등이 있다³¹⁾.

Polak-Ribiere 버전 CG 알고리즘은 대부분의 문제에서 가장 효과적인 방법으로 각 반복계산 과정에서 힘의 기울기가 이전에 반복된 정보와 결합해 이전 방향에 수직인 새로운 방향을 계산해준다.

Hessian-free Newton 알고리즘은 각 반복에서 에너지 퍼텐셜의 2차 모델이 켈레 기울기법에 의해 계산된다. 에너지의 제2도함수는 직접적으로 형성되지 않으며 유한차분 방향도함수에 의해 각 켈레의 방향으로 근사된다. 또한 에너지 최솟값에 가까워지면 뉴턴 방법처럼 동작하며 높은 정확도에 대한 2차 수렴 속도를 나타내며 CG 알고리즘으로 수행되지 않는 계산을 가능하게 한다.

Steepest descent 알고리즘은 반복되는 계산 과정에서 힘 벡터의 음의 기울기를 방향으로 설정한다. 이 알고리즘은 CG처럼 빠르게 수렴하지 않지만 몇몇 경우에서 이상치에 민감하게 반응하지 않아 실제 현상과 조금 벗어난 현상의 계산도 제대로 가능하다.

(3) 경계조건

LAMMPS에서 계의 경계는 하나의 시뮬레이션 상자 유형을 선택함으로써 정할 수 있다. 선택할 수 있는 경계 유형에는 4가지가 있다³²⁾.

먼저 첫 번째 주기적 유형은 입자가 경계를 가로질러 상호 작용하고 상자의 한쪽 끝을 빠져나가서 다른 쪽 끝을 다시 입력할 수 있음을 의미한다. 주기적 치수의 크기는 일정한 압력 경계조건 또는 상자 변형으로 인해 변경될 수 있다. 그리고 주기적 유형은 차원의 양면에 적용하는 옵션을 설정해야 한다. 나머지 세 가지 유형은 비주기적 상자에 관한 유형이다. 이

세 유형은 입자가 경계를 가로질러 상호작용하지 않고 상자의 한쪽에서 다른 쪽으로 이동하지 않도록 한다.

두 번째 비주기적이고 고정된 유형은 면의 위치가 고정되며 원자가 면의 바깥으로 이동하면 다음 단계에서 빠져 원자가 그대로 삭제된다.

세 번째 비주기적이고 수축 포장된 유형의 경우, 면의 위치는 이동 거리와 관계없이 해당 차원의 원자를 포함하도록 설정된다. 이때 현재 상자의 치수와 수축 포장된 상자의 박스 치수의 차이가 크면 병렬로 실행이 시작될 때 원자가 손실될 수 있다. 이는 이전의 상자 크기가 크게 변경되어 개별 크기가 크게 변경되었기 때문이다. 이러한 경우에는 수축 포장된 치수와 더 가깝게 초기 상자 치수를 설정하여 해결할 수 있다.

네 번째 유형은 비주기적이고 수축 포장되었을 때 최솟값을 채택하는 유형으로 수축 포장이 발생하지만, 경계는 생성된 데이터에서 규정한 값에 의해 제한된다. 예를 들어, 데이터에서 상단 z 면의 값이 50 인 경우 모든 원자의 최대 z 범위가 50 보다 작아 원자는 항상 50 이상에 배치된다. 이 유형은 빈 상자 시뮬레이션을 시작하거나 원자가 증발하는 경우처럼 상자의 한쪽 면에 공간을 남기고 싶은 경우에 유용하다.

(4) 초기조건

가속도는 힘에 의해 결정되고 힘은 분자간 거리인 퍼텐셜 에너지에 의해 정해지기 때문에 위치와 속도를 지정해야 한다. 초기위치는 랜덤하게 분자 위치를 지정하거나 격자구조로 지정할 수 있다. 랜덤하게 원자와 분자의 위치를 지정하는 것은 분자가 중복될 위험이 크기 때문에 주로 격자구조로 원자나 분자가 배치되며 이때 앙상블(ensemble) 개념이 사용 된다³³⁾.

앙상블은 시간에 대한 원자들의 운동을 전산 모사하는 것을 의미한다. 대표적인 앙상블의 세 가지 종류는 NVE, NVT, NPT이다. NVE 앙상블은

원자의 수, 체적, 에너지가 일정하고, NVT 앙상블은 원자의 수, 체적, 온도가 일정하며, NPT 앙상블은 원자의 수, 압력, 온도가 일정하다. 이 중에서 NVT 앙상블이 가장 많이 사용된다. 그 이유는 일반적으로 실험이나 시스템을 제어할 경우 온도를 기준으로 하는데 NVE는 온도가 일정하지 않아 모사에 어려움이 있고, NPT는 압력을 일정하게 하는 과정에서 불필요한 현상이 생겨 압축, 인장 응력 등의 기계적 물성치나 내부 응력에 민감한 실험이 되어 적절한 결과를 얻기 어렵기 때문이다.

온도는 Berendsen, Nose-hoover 온도계 등으로 조절된다. Berendsen 온도계는 계를 목표하는 온도로 이완시키는 데 매우 효율적이며 일반적으로는 응축위상(condensed-phase) 분자동역학 시뮬레이션에 사용된다. 하지만 계가 평형상태에 도달하면 앙상블은 NVT가 사용되는 것이 더 유리하며, 이 경우 Berendsen 온도계는 NVT에 사용될 수 없다. 이러한 이유로 계의 평형상태인 NVT에 사용하기 위하여 개발된 것이 Nose-hoover 온도계이다³⁴⁻³⁵.

제 3 장 해석 방법

3.1 해석 모델

해석 모델이 되는 샘플 시트의 규격은 Fig. 8과 같이 가로 길이는 341.6 Å이고 세로 길이는 100.6 Å이다. 샘플 시트는 x축 방향으로 좌우 양 끝을 인장하였고, 인장 속도는 0.17 Å/ps로 설정하였다. 샘플 시트를 모델링하는데 사용된 총 원자 수는 13,296 개다. 샘플 시트의 규격은 x축 방향으로 인장 시 균열의 파단 형태를 관찰하기 위해 Fig. 8과 같이 가로 길이를 세로보다 약 3배 정도 길게 하였다.

원자 시스템을 지정하는 앙상블의 종류는 NVT이다. NVT 앙상블은 원자의 수, 부피 및 온도가 일정하고 인장응력과 같은 기계적 물성의 예측에서 오류가 발생하지 않는 적절한 앙상블이다. 원자 수와 부피는 샘플 시트와 동일한 형태로 일정하게 유지시켰다. 온도는 Nose-hoover 온도 조절 장치로 제어되며, 실온정도인 300 K으로 고정하였다.

원자간 상호작용을 계산해주는 퍼텐셜은 CH.AIREBO를 선택해 탄소를 지정하였다. 탄소의 질량은 12 g으로 설정하였다. 이때 원자 사이 거리를 지정해 계산에 영향을 미치는 컷오프 거리는 AIREBO에서는 지정하는 일반적인 범위인 1.7~2.0 Å를 참고해 1.92로 지정하였다. 알고리즘은 CG를 채택해 최소화 과정을 거치게 하였다. 모든 계산은 뉴턴방정식에 지배하에 계산되도록 하는 옵션을 설정하였으며, 단위는 금속 옵션을 설정하였다. 따라서 응력 단위는 bar를 GPa 단위로 환산할 수 있다. 해석에 사용된 명령어의 더 자세한 사항은 부록에 스크립트 형태로 첨부하였다.

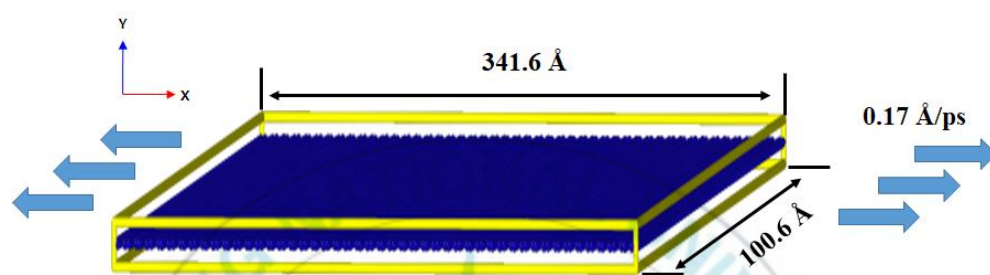


Fig. 8 Graphene sample sheet under tension.

Table 2 LAMMPS conditions.

Ensemble	NVT at 300 K
Potential	CH.AIREBO
Cut-off	1.92

3.2 균열삽입 모델링

그래핀 제작 공정에서 균열의 발생은 필연적이다. 따라서 그래핀 사용의 안전성을 위하여 균열에 대한 연구는 반드시 필요하다. 본 연구의 초기균열은 지그재그와 암체어가 혼합된 형태로, 제거된 원자의 개수는 18개이다. 제거된 원자 형태는 Fig. 9와 같이 나타내었다. 양옆 세로에 6개씩 총 12개, 가로에 총 6개가 제거되었다. 이와 같은 초기균열 형상은 Fig. 9와 같이 Model A, Model B, Model C에서 모두 동일하게 적용되었다.

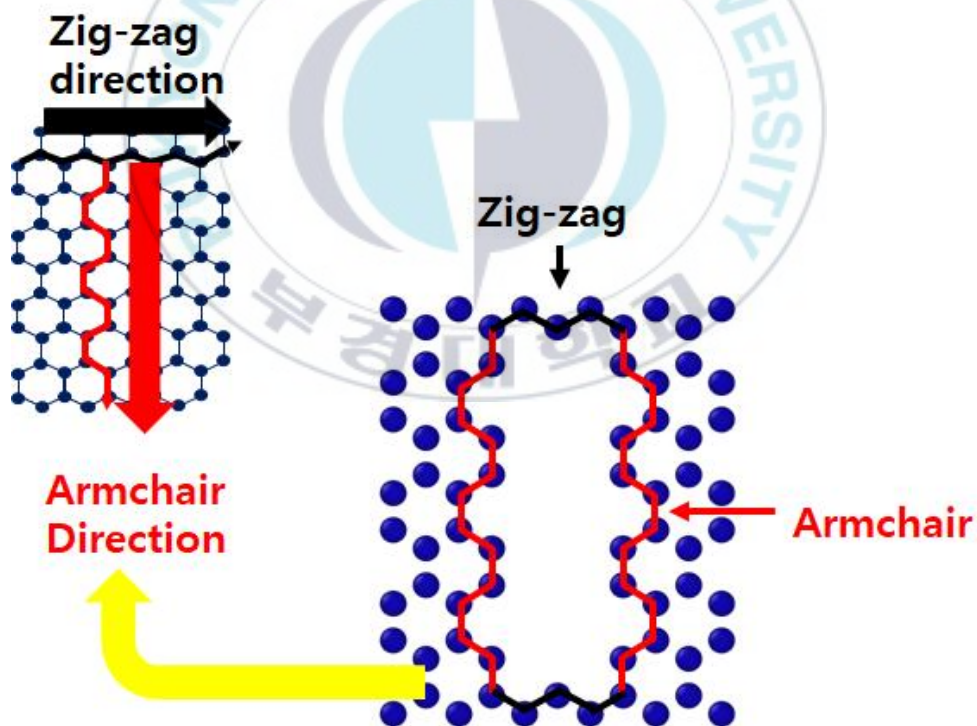


Fig. 9 Graphene crack shapes.

3.2.1 Model A : 초기균열 위치에 따른 분류

균열은 그래핀의 어느 위치에서나 무작위로 발생될 수 있다. 그러므로 Model A는 초기균열의 위치에 따른 그래핀 시트의 전체적인 경향을 확인하기 위한 해석 모델로 해석 케이스 간의 위치 차이를 최대한 크게 설정한 해석 모델이다. 각 케이스별 초기균열은 단일 그래핀 시트의 1/4 지점에서 각 모서리 부분에 삽입되었으며 인장해석이 수행되었다.

Fig. 10에 Model A의 초기균열 위치에 따른 각각의 해석 케이스를 나타내었다. 전체 해석 모델에서 1/4만을 지정하여 초기균열을 지정한 이유는 해석의 효율성을 위함으로 해석 모델이 시트 중앙선을 기준으로 대칭구조이기 때문이다.

Model A의 초기균열 위치에 따른 종류는 네 가지로 구분된다. Case 1은 그래핀 판의 1/4 영역에서 상부 좌측에 균열이 삽입되었으며 Case 2는 중앙 좌측에 균열이 삽입되었다. Case 3은 하부 좌측에 균열이 삽입되었으며 Case 4는 하부 중앙지점에 균열이 삽입되었다.

3.2.2 Model B : 초기균열 거리에 따른 분류

Model B는 단일 그래핀 판의 중앙 왼쪽 지점에서 중앙에 가깝게 균열을 삽입한 후 인장해석을 수행하였다. 거리를 고려한 균열의 삽입을 내부의 왼쪽에서 중앙지점까지 샘플 시트 1/2 기준으로 해석한 이유는 해석의 대칭성을 고려하면 동일한 응력 값을 보여 해석의 효율성을 위함이다.

Fig. 10에 나타난 Model B의 각 케이스는 약 18 Å 정도로 일정한 간격에 따라 총 9개로 구분하여 해석을 수행하였다.

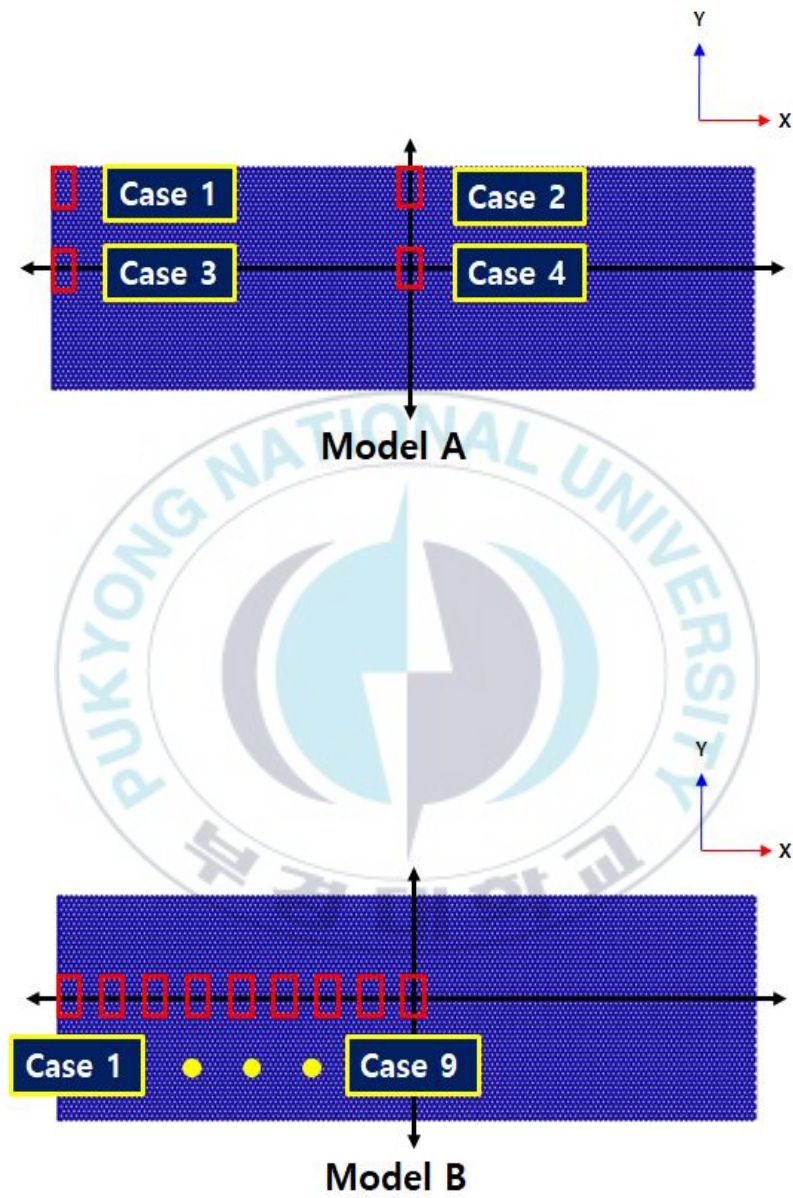
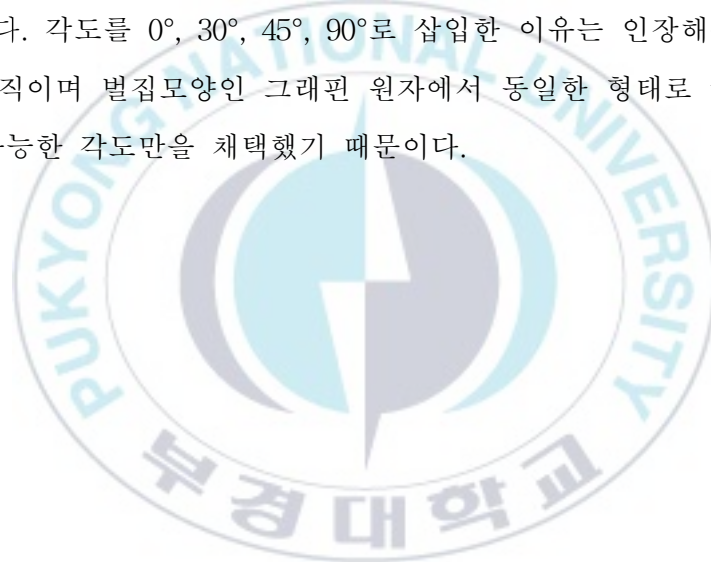


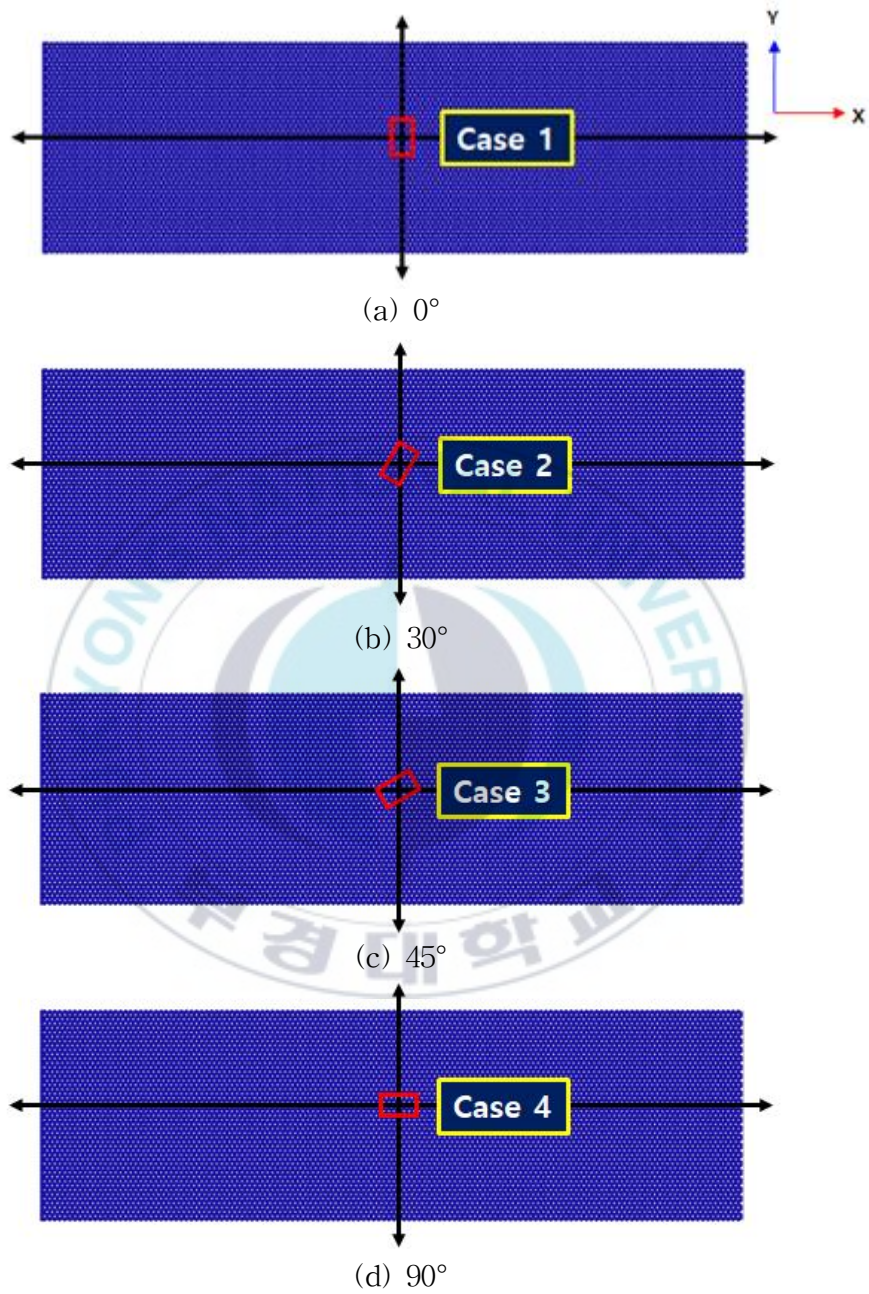
Fig. 10 Model A and Model B shapes.

3.2.3 Model C : 초기균열 각도

Model C는 단일 그래핀 판의 중앙지점에서 각도를 달리하여 균열을 삽입한 후 인장해석을 수행하였다. 각도를 고려한 균열 삽입 모델링을 Fig. 11과 같이 한 이유는 그래핀 원자의 방향성을 고려했기 때문이다.

Model C는 Fig. 11과 같이 총 4가지 케이스로 나뉘며 각 케이스는 다음과 같다. Case 1은 0° 로 초기균열이 삽입된다. Case 2는 30° 로 초기균열이 삽입된다. Case 3은 45° 로 초기균열이 삽입된다. Case 4는 90° 로 초기균열이 삽입된다. 각도를 0° , 30° , 45° , 90° 로 삽입한 이유는 인장해석의 방향인 x 축에 수직이며 벌집모양인 그래핀 원자에서 동일한 형태로 균열의 모양이 배향 가능한 각도만을 채택했기 때문이다.





Model C

Fig. 11 Model C shape.

제 4 장 결과 및 고찰

4.1 Model A : 초기균열 위치 결과 및 고찰

초기 균열의 위치 변수를 고려한 Model A의 결과는 다음과 같다. 모든 해석 케이스에서 초기균열은 인장하중으로 인한 응력-변형률 선도에서 최대응력 이후에 진전하였다. 또한 모든 해석 케이스에서 초기균열의 첫 개시 이후 응력값은 0으로 급격히 감소하였다. 이러한 결과는 Model A의 초기균열 위치를 달리한 해석에서 계산되는 최대응력이 곧 재료의 파단강도가 됨을 의미한다.

Fig. 12는 Model A 중 Case 1의 균열진전 형태이다. 변형률의 변화는 첫 균열이 개시하는 시점의 변형률인 0.19와 완전히 파단된 시점의 변형률 0.205의 차이가 약 0.015로 나타났다. 이는 그래핀 시트가 첫 균열이 개시된 후 순간적으로 파단했음을 의미한다. 이렇듯 파단강도 이후에 응력의 정체구간 없이 바로 파괴되는 현상은 취성파괴로 판단할 수 있다. 초기균열의 위치를 고려한 Model A의 Case 2~4 해석 결과는 역시 이처럼 꾸준한 응력상승을 보이다 순간적인 파괴 거동을 나타내었다.

결과적으로 균열로 인한 그래핀의 파단을 예방하기 위해서는 견딜 수 있는 최대응력 이하의 하중이 가해지도록 하거나, 일정 응력을 견딜 수 있도록 층수를 높이거나 다른 재료와 혼합하여 복합구조로 제작하는 등의 노력이 필요함을 나타내고 있다.

Case 1~4 각각의 응력-변형률 선도를 Fig. 13~16에 나타내었다. 초기균열이 그래핀 상부에 위치한 Case 1, Case 2의 경우 중 Case 1은 초기균열이 Fig. 13과 같이 그래핀 시트 상부에서 하중점에 가까운 왼쪽 위에

위치하고 파단강도는 114 GPa로 나타났다. 이때 변형률은 0.255로 계산되었다. 반면 Case 2는 Fig. 14와 같이 초기 균열이 그래핀 시트의 하중점에서 떨어진 상부 중앙에 위치한 경우이며 이때 파단강도는 101 GPa, 변형률은 0.175로 계산되었다.

결과적으로 Case 2에 위치한 균열의 파단강도가 Case 1보다 작게 나타났고 이러한 결과는 초기균열이 상부에 위치할 때, 하중점에서 위치가 멀어질수록 더 낮은 응력수준에서 초기균열이 개시함을 나타낸다. 즉, 그래핀의 파괴거동 측면에서는 초기균열이 그래핀 시트 상부에 위치할 때 상부 중앙에 위치한 균열이 치명적으로 작용함을 의미한다.

균열이 그래핀 시트 내부에 위치한 Case 3, Case 4의 결과는 Fig. 15과 16에 나타내었다. Case 1과 유사하게 그래핀 시트 내부에서 하중점에 가까운 Case 3의 해석 결과, 파단 강도는 319 GPa로 나타났으며 이때 변형률은 0.33으로 계산되었다. 반면에 초기균열이 Case 2와 같이 하중점에서 멀리 떨어져 위치한 Case 4의 결과, 파단강도는 122 GPa로 나타났으며 이때 변형률은 0.255로 계산되었다.

Case 1과 2의 해석 결과와 마찬가지로 하중점에서 멀리 떨어진 중앙에 초기균열이 위치할 때(Case 4)가 초기균열이 하중점에서 가까이 위치할 때(Case 3) 보다 낮은 응력을 나타내었다. 이러한 결과는 마찬가지로 그래핀의 파괴거동 측면에서 초기균열이 그래핀 시트 내부에 위치할 때, 중앙에 위치한 균열이 바깥에 위치한 균열보다 더 치명적으로 작용함을 의미한다.

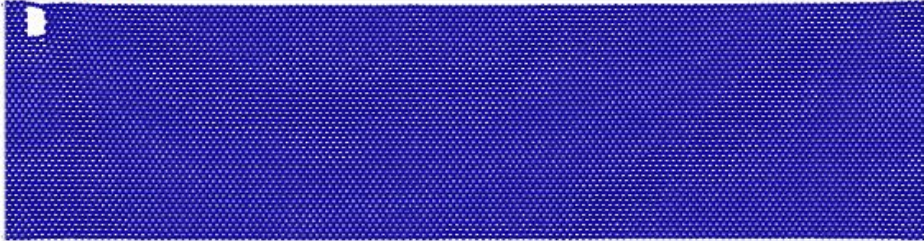
하지만 Case 1~4의 해석 결과를 각각 비교·고찰할 때 초기균열이 그래핀 상부에 위치한 Case 1과 2 사이의 응력 차이가 13 GPa인 반면, 초기균열이 그래핀 시트 내부에 위치한 Case 3과 4 사이의 응력 차이는 197 GPa로 매우 큰 차이를 나타내었다. 즉 초기균열이 그래핀의 위쪽 모서리인 시트 바깥 면에 존재할 때 보다 그래핀 시트의 내부에 위치할 때의 응력

변화가 크게 나타났다. 응력해석에서는 계산되는 최대·최솟값도 중요한 결과이지만 응력변화의 측면에서는 큰 폭으로 변화하는 구간을 불안정한 구간으로 판단한다. 따라서 이러한 관점으로 볼 때 Model A의 해석 결과는 초기균열이 그래핀 시트의 중심부에 존재할 때, 초기균열의 위치에 따른 재료의 불안전성이 매우 높음을 의미한다.

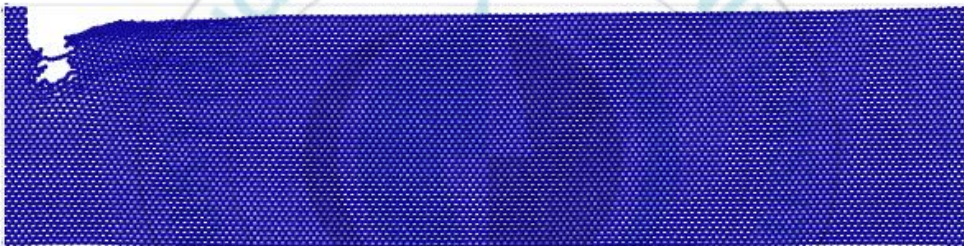
따라서 그래핀 시트 내부에서 초기균열의 위치를 변수로 하는 추가 해석의 필요성이 제기되었으며 Case 3과 Case 4 사이에서 위치를 달리하여 총 9 개의 해석케이스를 구분한 Model B 해석을 수행하였다.



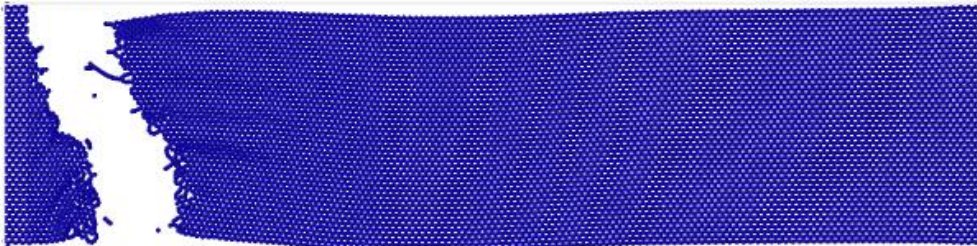
$\varepsilon = 0.14$



$\varepsilon = 0.19$



$\varepsilon = 0.205$



Model A Case 1

Fig. 12 Model A crack propagation.

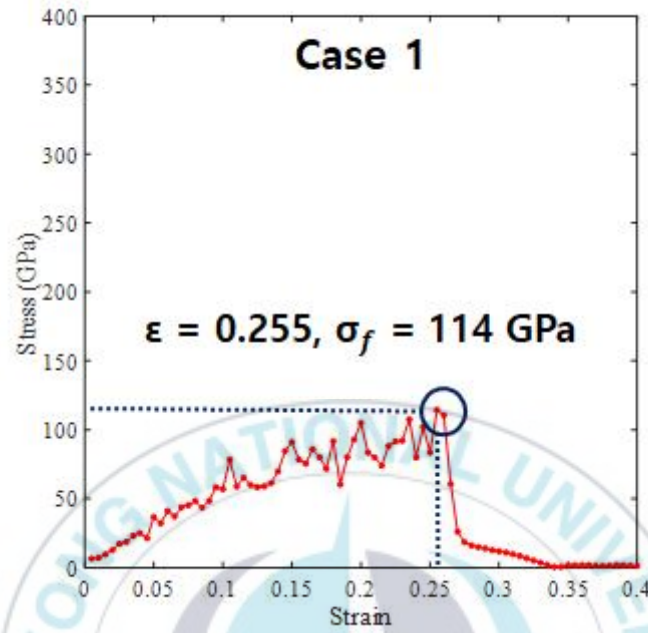


Fig. 13 Model A Case 1 stress-strain curve.

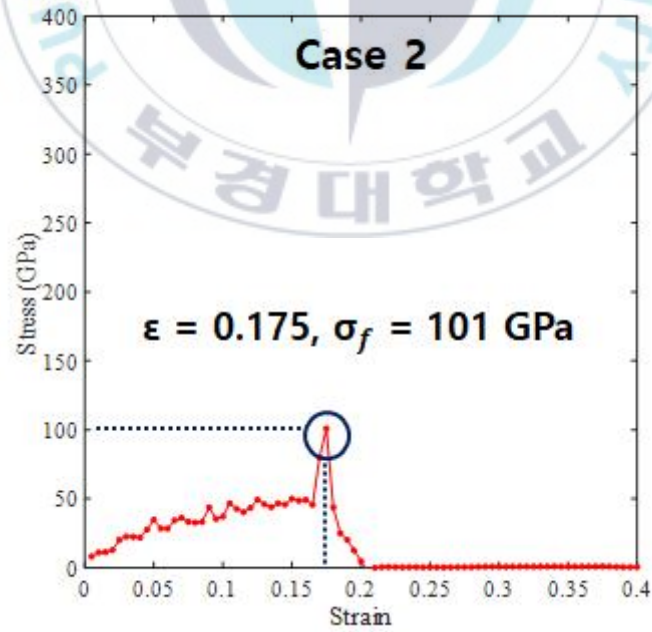


Fig. 14 Model A Case 2 stress-strain curve.

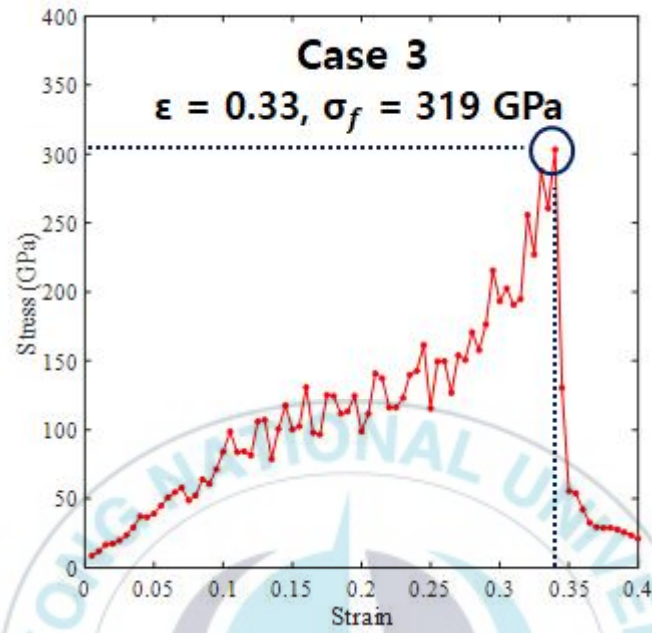


Fig. 15 Model A Case 3 stress-strain curve.

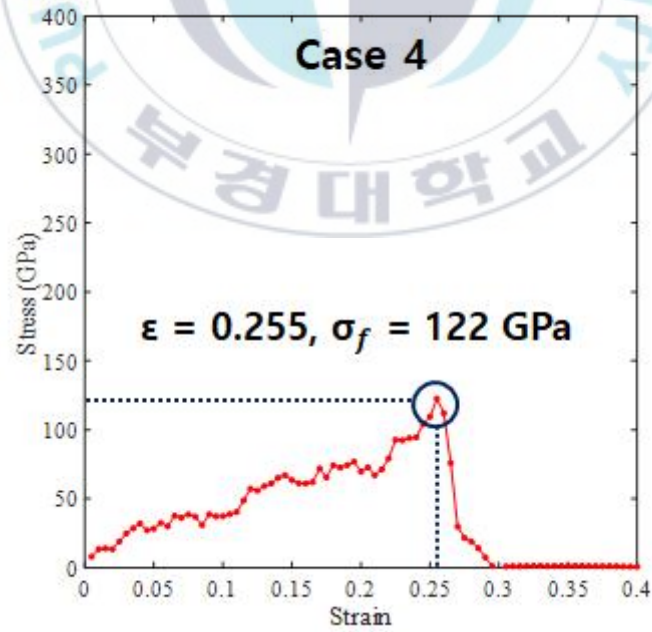


Fig. 16 Model A Case 4 stress-strain curve.

4.2 Model B : 초기균열 거리의 결과 및 고찰

Model A의 결과에 의하면 그래핀 시트 내부에 위치한 균열은 Case 3과 4 사이의 응력 차이가 크게 나타났다. 이는 균열의 위치가 재료의 안전성에 미치는 영향의 정도 차이가 큰 것을 의미한다. 따라서 이러한 차이를 더 명확히 파악하기 위해 Case 3과 Case 4를 양 끝 기준으로 삼고, 양 기준 내에서 초기균열의 거리가 달라짐에 따라 그래핀 시트의 응력거동에 미치는 영향을 Model B 해석으로 평가하였다. 초기균열 간의 거리 간격은 약 $18 \text{ \AA}$ 으로 설정하였으며 아홉 개의 해석 결과를 Case 1~9로 표시하여 Fig. 18~26에 나타내었다.

Fig. 17은 거리에 따른 해석 모델의 대표적인 균열진전 형상을 보여주고 있다. Model A와 마찬가지로 도시화한 균열진전의 양상이 Case 1~9의 모든 구간에서 유사하게 나타났다.

균열의 첫 진전은 45° 아래 대각선 방향으로 첫 개시가 발생하였으며 이후 하단의 끝까지 순간적으로 파단 하였다. 이후 상부에 가교된 나머지 탄소원자가 연속적으로 파단하여 그래핀 시트는 완전히 파단하고 있다.

Model A와 Model B에서 초기균열은 모두 하중방향에 수직하여 존재하고 있다. 하지만 구조물에 발생할 수 있는 균열이 이처럼 하중방향에 대하여 항상 수직일 수는 없다. 따라서 하중방향과 초기균열의 각도 배치를 달리할 때 그래핀 시트의 파괴거동을 확인하기 위하여 Model C에서 초기균열을 회전시켜가며 초기균열의 각도를 변수로 하는 해석을 수행하였다.

또한 그래핀 시트 내부 좌측을 기준으로 약 $18 \text{ \AA}$ 에 처음 삽입된 Case 1의 결과를 Fig. 18에 나타내었다. 해석 결과, 파단강도는 319 GPa 이고, 변형률은 0.33 으로 나타났다. 반면, Fig. 19에 나타낸 그래핀 시트 내부 왼쪽 약 $36 \text{ \AA}$ 거리에 균열이 삽입된 Case 2의 파단강도는 287 GPa 이고, 변형

률은 0.34로 나타났다. 즉 파단응력이 Case 1보다 32 GPa 정도 감소한 것을 알 수 있다. 이러한 결과는 Case 2에 위치하는 초기균열이 Case 1에 위치하는 초기균열보다 그래핀의 파괴거동에 영향을 크게 미치는 것을 의미한다.

다음으로 Case 3의 결과는 Fig. 20에 나타내었다. Case 3에서, 파단강도는 200 GPa이고, 변형률은 0.295로 나타났다. Case 2와 비교하여 약 87 GPa 정도의 큰 응력이 감소했음을 알 수 있다. Case 4의 결과는 Fig. 21에 나타내었으며, 파단강도는 221 GPa이며, 변형률은 0.3으로 나타났다. 이러한 결과는 Case 3보다 21 GPa 정도 증가하였으나 Case 2와 비교할 때에는 66 GPa로 크게 감소하였음을 알 수 있다.

다음으로 Fig. 22에 나타난 Case 5의 결과에서는 파단강도는 116 GPa, 변형률은 0.285로 나타났다. 즉, Case 4와 비교하여 파단강도가 약 105 GPa로 52 % 감소하여 절반 이상 감소하였음을 알 수 있다. Model B의 9 가지 해석 결과 중 해당 Case에서 가장 낮은 파단강도가 나타났으며 이는 Case 5에 위치하는 초기균열이 그래핀의 파괴거동에 가장 큰 영향을 미치는 것을 의미한다.

좌측 기준점으로부터 108 Å 떨어진 거리에 초기균열이 존재하는 Case 6의 결과는 Fig. 23에 나타내었다. 계산된 Case 6의 파단강도는 139 GPa로 나타났으며 이때 변형률은 0.295로 계산되었다. 이는 Case 5와 비교하여 34 GPa 증가한 값이며 Case 4와 비교할 경우에는 61 GPa 감소한 결과이다. 즉, 이러한 결과는 Case 6에 초기균열이 존재할 때가 Case 4에 존재하는 초기균열보다 파괴되기가 쉬우며 Case 5에 존재하는 초기균열보다 파괴저항이 큰 것을 의미한다.

Case 6에서 18 Å 떨어진 곳에 초기균열이 존재하는 Case 7의 해석 결과는 Fig. 24에 나타내었다. 계산된 파단강도는 129 GPa로 얻어졌으며 이때

변형률은 0.29로 나타났다. 이러한 결과는 Case 6과 비교할 때 10 GPa 정도 저하된 결괏값이다. 즉 Case 7의 초기균열이 Case 6보다 그래핀 시트의 균열로 인한 파괴거동을 위험하게 만들고 있다.

Case 8로 구분한 거리에 초기균열이 삽입된 해석 결과는 Fig. 25에 나타내었다. 이때 파단 강도는 145 GPa로 계산되었으며 변형률은 0.275로 나타났다. 해석 결과는 이전 Case 7과 비교할 때 16 GPa 정도 증가하였다. 즉, Case 7에 존재하는 초기균열이 Case 8보다 위험하게 작용하고 있다.

마지막으로 Case 9 거리에 균열이 삽입된 모델링의 결과는 Fig. 26에 나타내었다. 계산된 파단강도는 122 GPa로 나타났으며 이때 변형률은 0.255로 계산되었다. 이전 해석 케이스와 비교해 파단응력이 23 GPa 감소하였음을 알 수 있다. 즉, Case 9에 존재하는 초기균열이 Case 8에 보다 위험하게 작용하고 있음을 알 수 있다.

결과적으로 초기균열이 하중점으로부터 거리가 달라지는 본 해석 모델은 거리가 멀어질수록 대체로 파단응력이 감소하는 경향을 나타내었다. 정확한 결과를 고찰하기 위하여 Fig. 27에 Case 1~9에서 얻어진 파단응력과 변형률 결과를 종합하여 그래프로 나타내었다.

Model A와 마찬가지로 파단강도와 파단변형률은 각 해석케이스의 응력-변형률 선도에서 최대결괏값을 의미하며 이는 Model B의 그래핀 시트 또한 취성파괴거동을 나타냄을 의미한다. 균열의 거리는 Fig. 27 상부에 도시한 것과 같이 x좌표를 기준으로 표기하고 있다. 전체적인 해석 결과 경향은 파단응력이 x축의 우측 방향으로, 즉 균열이 중앙에 가까워질수록 점진적으로 감소하고 있다. 그리고 이때 변형률 역시 비슷한 감쇠적인 추세를 보인다. 세부적으로는 파단응력이 Case 4에서 Case 5로 초기균열의 거리가 달라질 때, 응력이 약 50 % 가장 크게 감소하였으며 이후의 감소와 증가는 미소한 변화량만을 보인다. 변형률의 결과 또한 마찬가지로 Case 2

에서 Case 3 사이와 Case 4에서 Case 5 사이에서 초기균열의 거리가 변화할 때 가장 큰 변화폭을 나타내었으며 이후의 증감은 미소하게만 변화하고 있다. 이러한 결과는 하중점에서 가까운 영역에서의 초기균열의 거리변화가 그래핀 시트의 파괴거동에 미치는 영향이 큰 것을 의미한다.



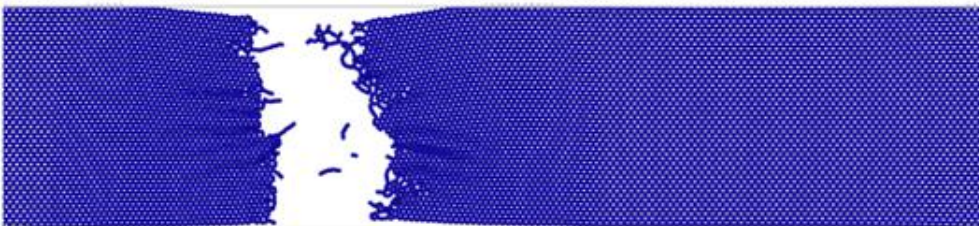
$\epsilon = 0.285$



$\epsilon = 0.3$



$\epsilon = 0.305$



Model B Case 7

Fig. 17 Model B crack propagation.

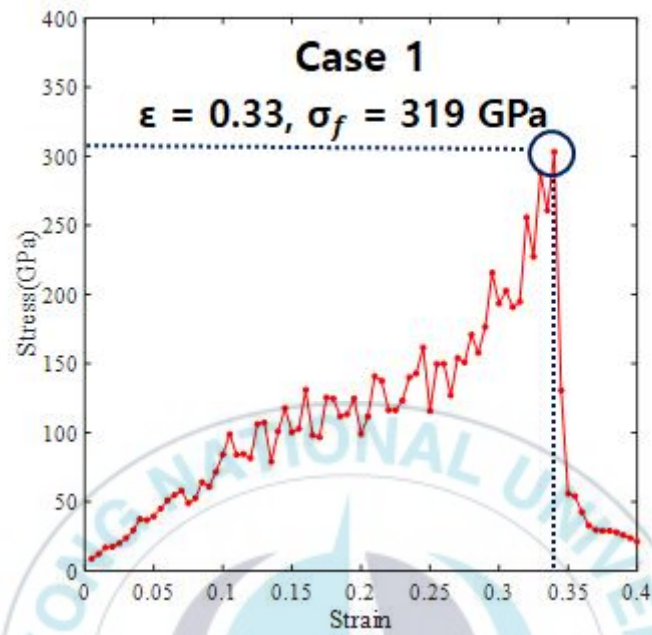


Fig. 18 Model B Case 1 stress-strain curve.

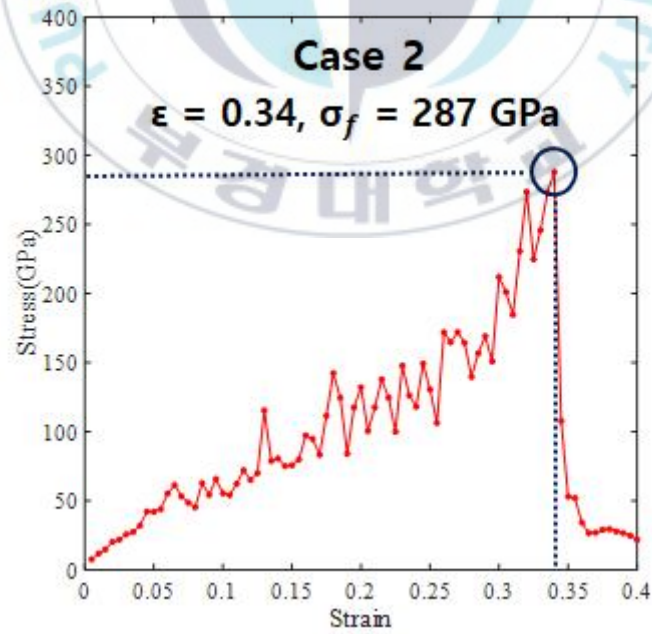


Fig. 19 Model B Case 2 stress-strain curve.

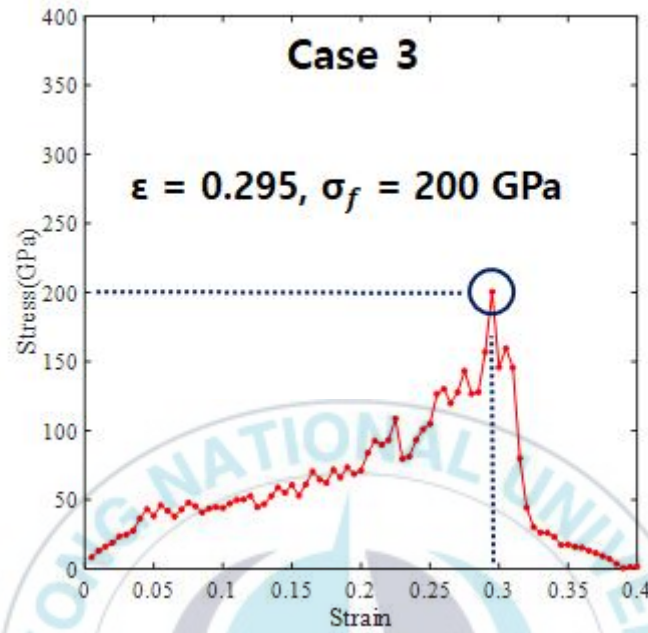


Fig. 20 Model B Case 3 stress-strain curve.

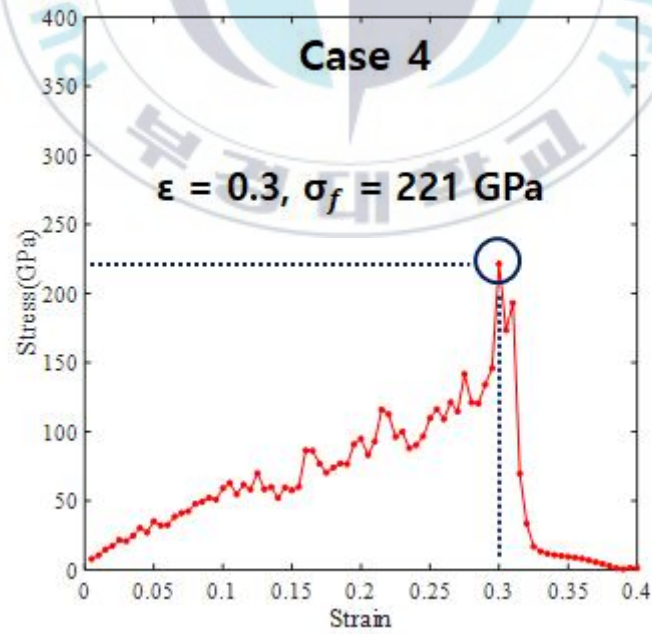


Fig. 21 Model B Case 4 stress-strain curve.

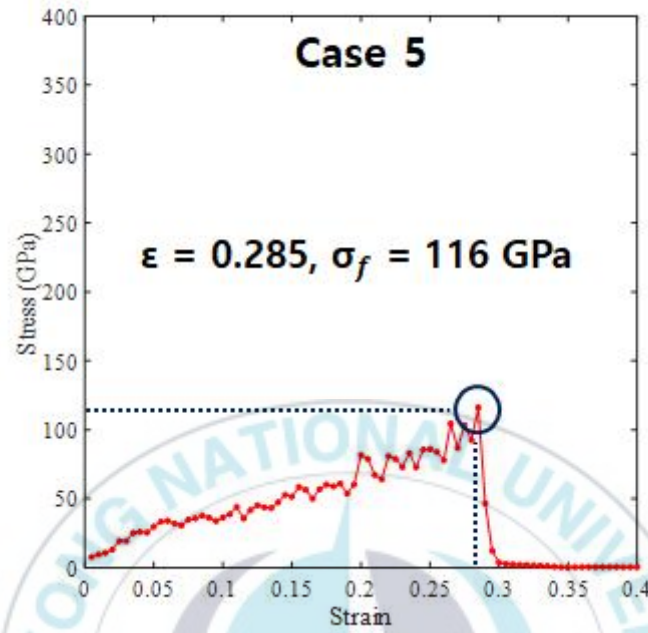


Fig. 22 Model B Case 5 stress-strain curve.

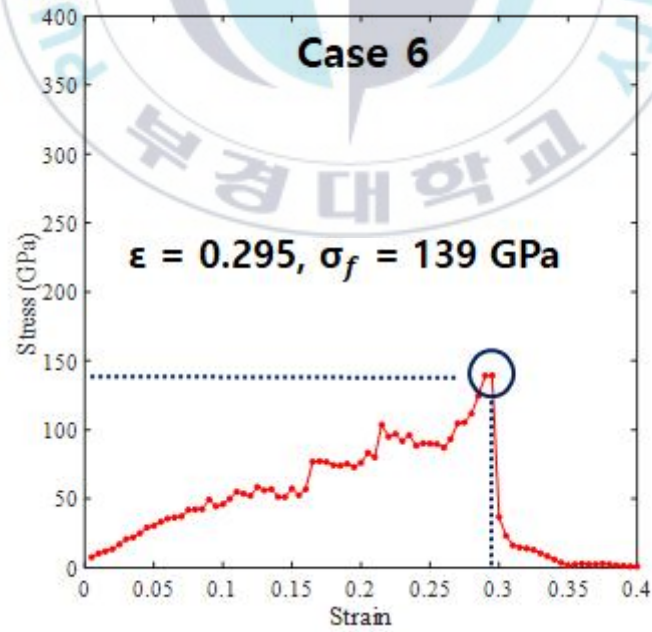


Fig. 23 Model B Case 6 stress-strain curve.

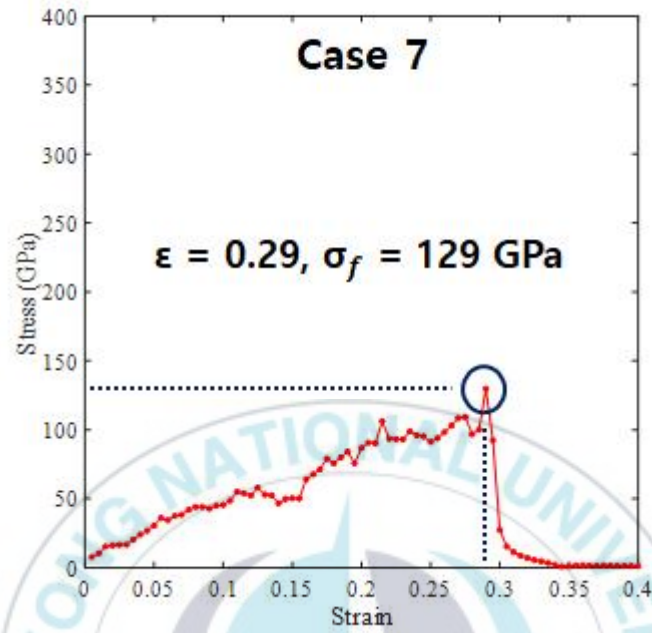


Fig. 24 Model B Case 7 stress-strain curve.

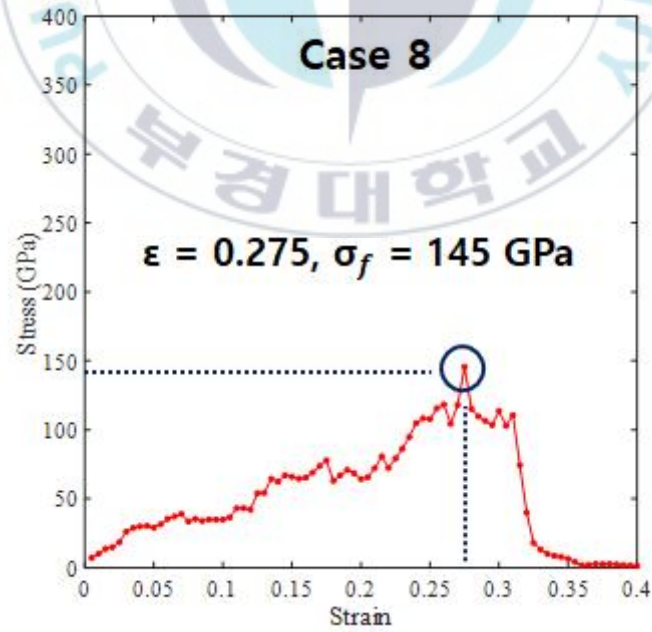


Fig. 25 Model B Case 8 stress-strain curve.

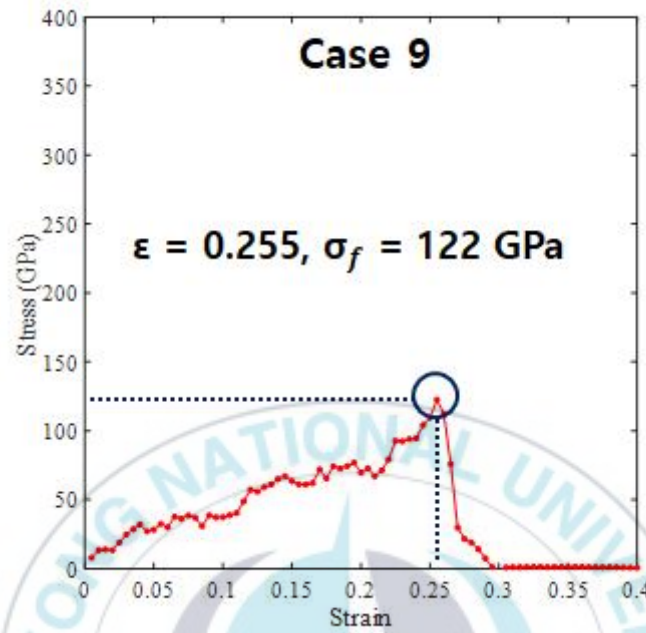


Fig. 26 Model B Case 9 stress-strain curve.

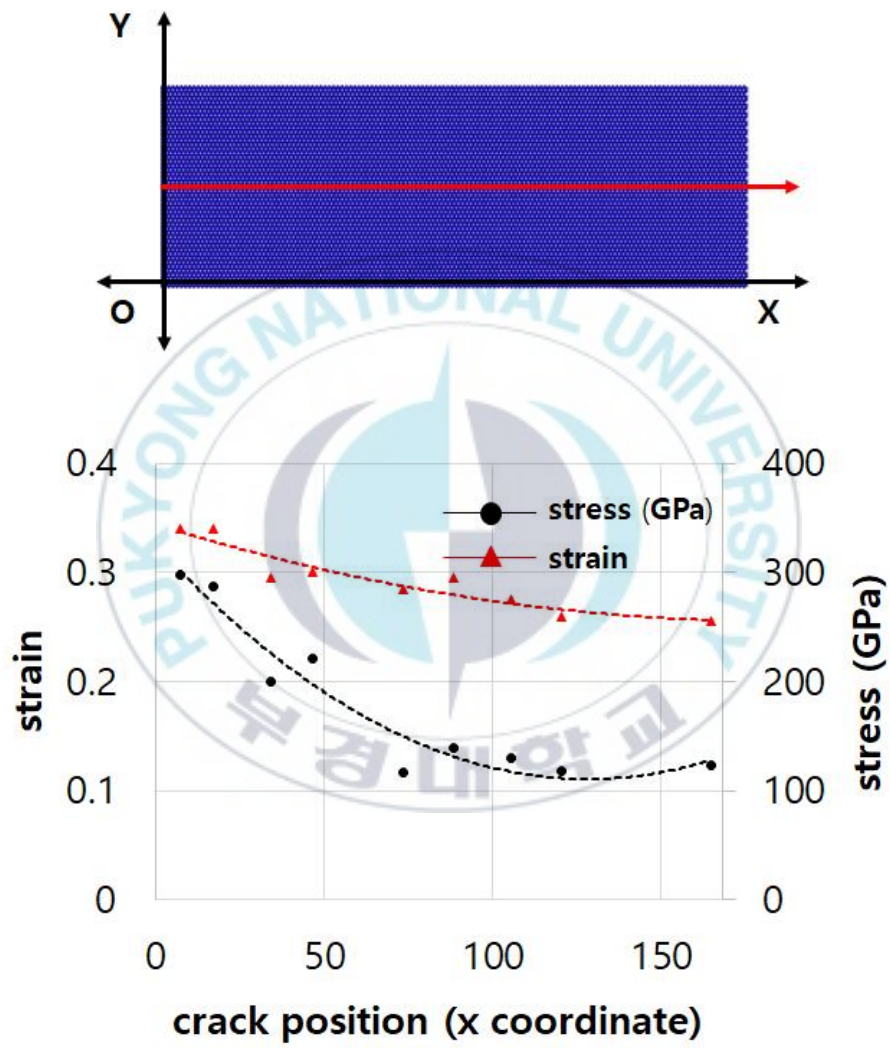


Fig. 27 Model B stress and strain variation according to the crack position.

4.3 Model C : 초기균열 각도의 결과 및 고찰

Model C는 Model A, Model B가 균열의 각도를 0° 인 세로로 동일하게 삽입해 위치와 거리 변수만을 고려했던 것과 달리 균열의 각도 변수를 0° , 30° , 45° , 90° 로 달리하여 해석한 모델이다. 그래핀이 육각형의 벌집 모양이고, 각도는 다르지만, Model A, Model B와 동일한 18개의 원자의 수를 제거했을 때 나오는 경우의 수가 총 4개이기 때문에 네 가지의 각도 변화만 고려하여 해석하였다.

Fig. 28~31은 각도를 고려한 Model C 케이스별 균열진전 형상을 보여주고 있다. Fig. 28과 같이 초기균열의 각도가 0° (Case 1)인 경우는 균열이 개시된 이후 최종 파단면이 비교적 한 갈래로 완전 파단됨을 알 수 있다. Fig. 29와 같이 초기균열의 각도가 30° (Case 2)로 개시된 경우는 0° (Case 1)와 유사하게 균열이 진전되다가 최종 파단면에서 상부 파단면이 두 갈래로 나뉘며 완전 파단됨을 알 수 있다. Fig. 30과 같이 초기균열의 각도가 45° (Case 3)로 개시된 경우는 0° (Case 1)와 유사하게 균열이 개시된 이후 한 갈래로 완전 파단됨이 확인되었다. 마지막으로 Fig. 31과 같이 초기균열의 각도가 90° (Case 4)로 개시된 경우는 30° (Case 2)와 유사하게 균열이 개시된 이후 상부 왼쪽 면이 두 갈래로 나뉘며 완전 파단됨을 알 수 있다.

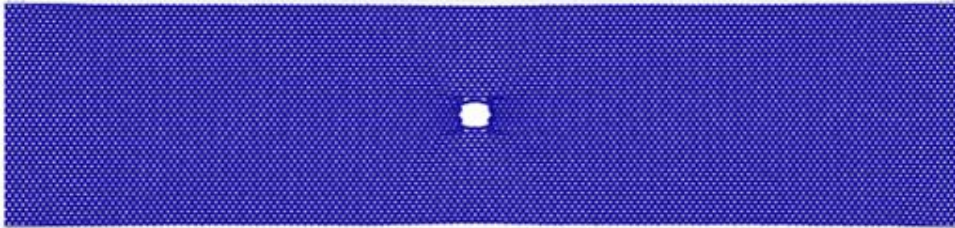
초기균열이 0° 로 삽입된 Case 1의 결과는 Fig. 32에 나타내었다. 해당 Case는 Model A의 Case 4와 같다. 파단강도는 122 GPa, 변형률은 0.255로 나타났다. 반면, 초기균열이 30° 로 삽입된 Case 2의 결과는 Fig. 33과 같다. 해석 결과, 파단강도는 130 GPa, 변형률은 0.27로 나타났다. 초기균열이 0° 로 삽입된 Case 1과 비교해 16 GPa 정도 증가하였음을 알 수 있다. 이는 0° 의 초기균열이 30° 로 위치하는 균열보다 더 쉽게 파괴될 수 있음을 나타낸다.

초기균열이 45°로 삽입된 Case 3의 결과는 Fig. 34에 나타내었으며 파단 강도는 142 GPa, 변형률은 0.24로 나타났다. 초기균열이 0°로 삽입된 Case 1과 비교해 20 GPa 정도 증가하였고, 초기균열이 30°로 삽입된 Case 2과 비교하면 12 GPa 정도 증가하였음을 알 수 있다. 이는 45°의 초기균열이 0°, 30°로 위치하는 균열보다 높은 파단강도를 갖는 것을 의미한다.

마지막으로 초기균열이 90°로 삽입된 Case 4의 결과는 Fig. 35에 나타내었으며 해석 결과, 파단강도는 약 362 GPa이고, 변형률은 0.355로 나타났다. Case 4의 결과는 Case 1과 비교하면 240 GPa 증가하였다. Case 2와 비교하면 232 GPa, Case 3과 비교하면 220 GPa 증가하였다. 이렇듯, 다른 3개의 각도와 비교해 90°로 균열이 삽입된 경우 응력이 가장 높게 나온 이유는 인장 방향인 x축과 평행한 방향으로 균열이 삽입되었기 때문이다.

결과적으로 Model C의 해석 결과 하중방향에 대한 초기균열의 각도가 0°로 배향된 해석 케이스가 가장 낮은 파단응력이 계산되어 그래핀 시트의 파괴거동에 가장 치명적으로 작용함이 나타났다. 이는 Model A, Model B에서 그래핀의 원자 배열이 초기균열의 0° 방향으로 먼저 깨어졌던 결과에 기인하는 것으로 판단된다. 반면, 하중방향에 수평하여 배치된 초기균열의 파단강도가 가장 크게 계산되었는데 이는 하중방향으로 찢어진 그래핀 원자는 재료의 파괴거동에 크게 영향을 미치지 않음을 의미한다.

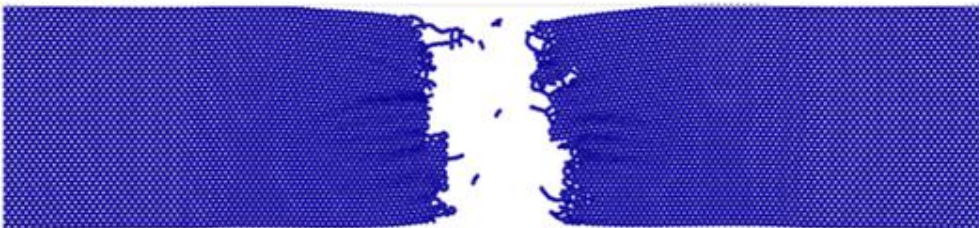
$\epsilon = 0.26$



$\epsilon = 0.285$



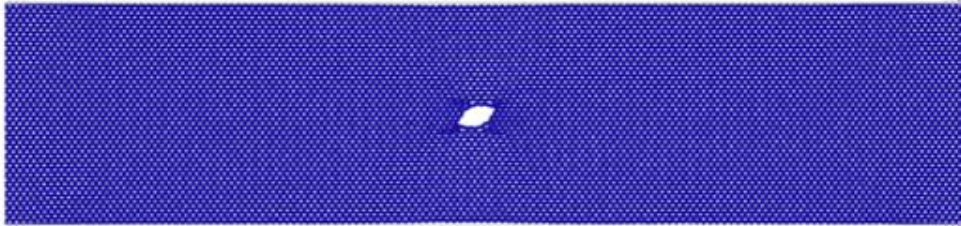
$\epsilon = 0.295$



Model C Case 1

Fig. 28 Model C Case 1 crack propagation.

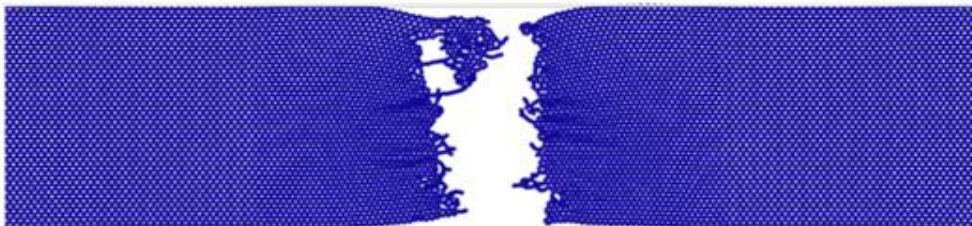
$\epsilon = 0.27$



$\epsilon = 0.285$



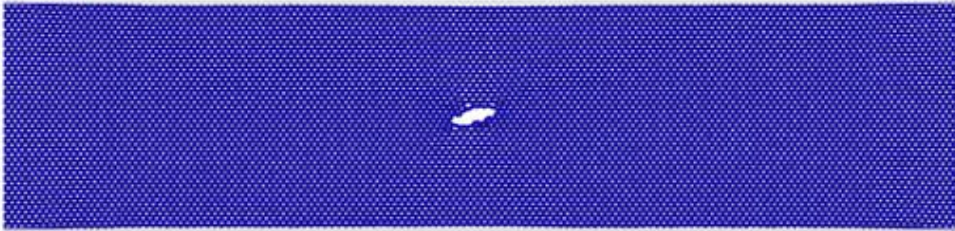
$\epsilon = 0.29$



Model C Case 2

Fig. 29 Model C Case 2 crack propagation.

$\epsilon = 0.245$



$\epsilon = 0.27$



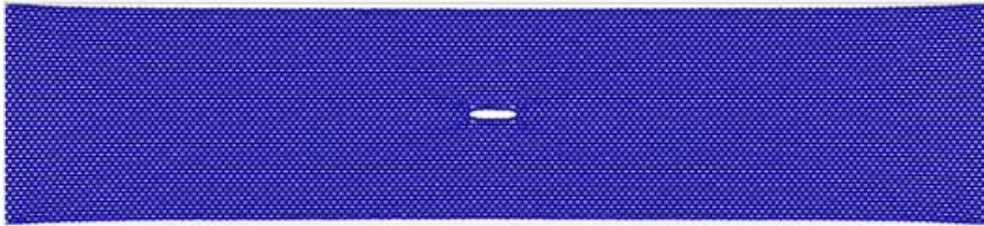
$\epsilon = 0.275$



Model C Case 3

Fig. 30 Model C Case 3 crack propagation.

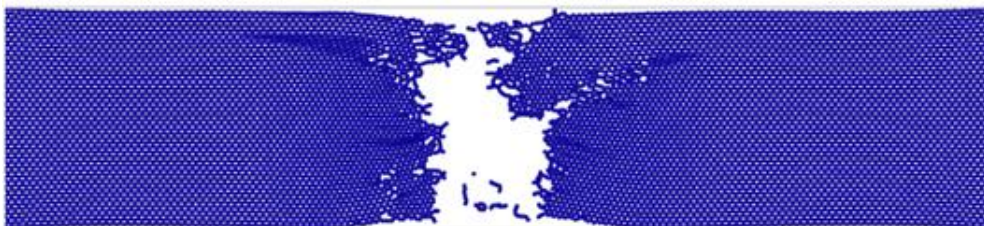
$\epsilon = 0.35$



$\epsilon = 0.36$



$\epsilon = 0.365$



Model C Case 4

Fig. 31 Model C Case 4 crack propagation.

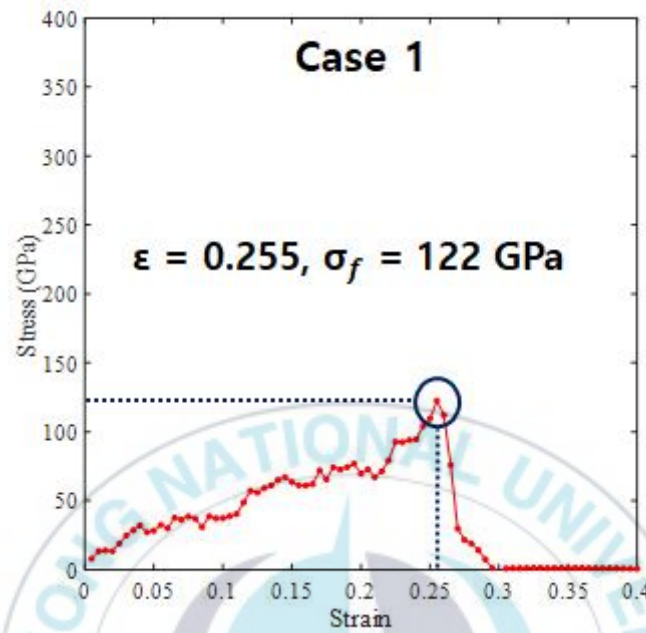


Fig. 32 Model C Case 1 stress-strain curve.

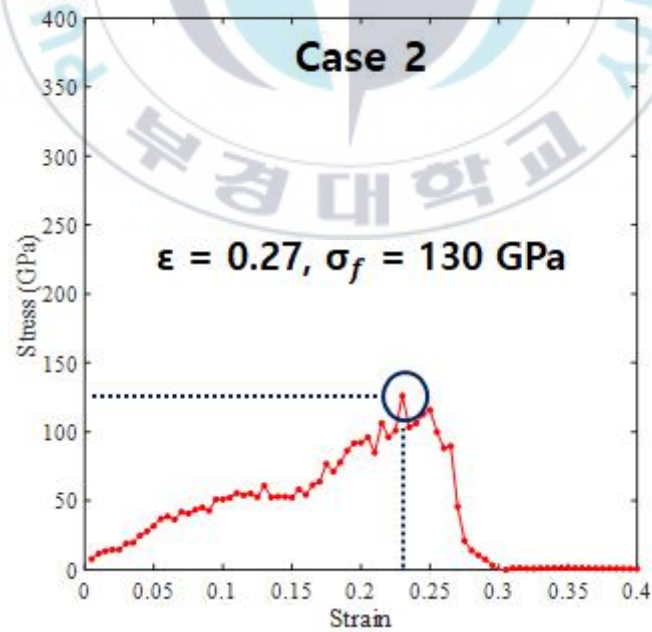


Fig. 33 Model C Case 2 stress-strain curve.

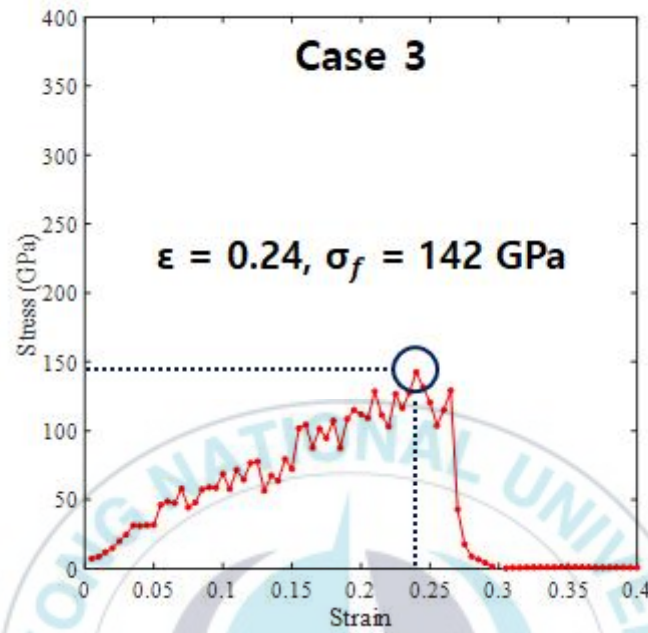


Fig. 34 Model C Case 3 stress-strain curve.

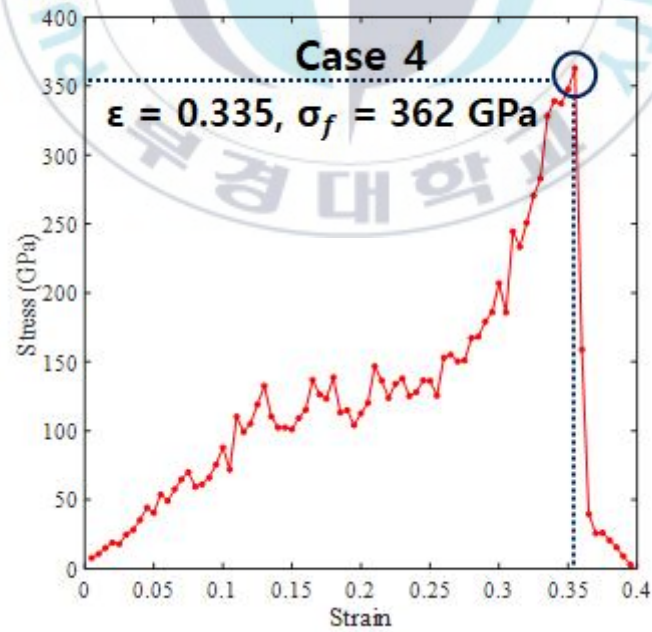


Fig. 35 Model C Case 3 stress-strain curve.

제 5 장 결 론

본 연구는 그래핀의 제조과정에서 위험요인으로 작용하는 초기균열의 여러 변수가 그래핀의 파괴거동에 미치는 영향을 평가하기 위해 수행되었다. 초기균열의 변수로는 위치, 거리 및 각도를 고려하여 각각의 해석 모델 A, B, C로 구분하였다. 또한 나노스케일의 구조를 갖는 그래핀을 표현하기 위하여 분자동역학적 해석평가를 수행하였으며 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 먼저, 인장력을 받는 해석 모델에서 초기균열로 인한 그래핀의 파손과 응력-변형률 선도의 상관관계는 Model A, Model B, Model C 모두 각각의 극한강도가 재료의 파단강도로 나타났다. 이러한 결과는 그래핀이 초기균열이 처음 개시된 후 순간적으로 모두 파괴되는 취성파괴의 거동을 나타냄을 의미한다.

(2) 각각의 해석 모델의 결과로는 균열의 위치(Model A)에 관하여 초기균열이 그래핀 시트 상부 중앙에 위치한 균열(Case 2)이 가장 취약한 것으로 나타났다. 하지만 이때 그래핀 시트 상부에 두 초기균열로 인한 파단강도의 차이는 13 GPa로 나타난 반면 그래핀 시트 내부에 위치한 두 초기균열로 인한 파단강도의 차이는 197 GPa로 매우 크게 나타났다.

(3) Model B에서 균열의 거리가 좌측 끝에서 중앙으로 이동할 때, 파단응력과 변형률은 대체로 감소하는 경향을 보였다. 이때 가장 큰 변화폭이 나타났던 구간은 좌측 하중점을 기준으로 1/4 지점(Case 4에서 Case 5로 변화하는 순간)에서 나타났다. 즉 그래핀 시트가 인장력을 받을 때 일반적으로는 하중 인가위치에서 떨어진 위치에 존재하는 초기균열이 그래핀 시트의 파괴거동에 더 큰 영향을 미쳤다. 그리고 이때 좌측 하중점에서 1/4 지점의 초기균열이 가장 큰 영향을 미치는 것으로 나타났기 때문에 해당

위치의 초기균열에 관하여는 특히 더 주의가 필요함을 알 수 있다.

(4) 초기균열의 각도 변화(Model C)에 관한 해석 결과, 초기균열이 그래핀 시트 길이방향에 대하여 0° 로 배향된 경우가 가장 낮은 파단강도가 나타났다. 이러한 결과는 하중방향에 대하여 0° 로 초기균열이 존재할 시에 그래핀 시트에 가장 위험하게 작용함을 의미한다. 아울러 파단강도가 가장 높게 나타난 결과는 초기균열의 배향이 그래핀 시트 방향에 대하여 90° 였다. 이는 인장력에 평행한 방향으로 균열 각도는 그래핀의 결함으로 크게 작용하지 않는 것을 의미한다.

이상의 결과들은 차세대 소재로 불리는 그래핀의 제조과정에서 발생하는 균열들에 관한 평가기준으로 사용되어 그래핀 시트의 안정성을 평가할 수 있는 기준으로 활용될 것으로 판단된다. 차후 본 논문에서 제시한 초기균열의 변수에 더하여 다양한 그래핀 시트와 균열의 형상에 관한 해석계산이 수행된다면 제조과정뿐만 아니라 사용 중 발생하는 균열까지 고려한 유용한 해석수단으로 사용될 수 있으며 또한 그래핀 자체의 균열에서 나아가 그래핀이 복합재료로 활용될 때 타 재료의 균열에 미치는 영향을 고려한 해석수단으로 사용될 수 있을 것으로 사료된다.

참 고 문 헌

- 1) K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva and A. A. Firsov, “Electric field effect in atomically thin carbon films”, Science, Vol. 306, No. 5696, pp. 666–669, 2004. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- 2) <http://www.eng.cam.ac.uk/news/first-graphene-based-flexible-display-produced> (Jan. 6, 2020)
- 3) <https://www.cam.ac.uk/research/news/new-graphene-based-inks-for-high-speed-manufacturing-of-printed-electronics> (Jan. 6, 2020)
- 4) H. J. Lee, T. K. Choi, Y. B. Lee, H. R. Cho, R. Ghaffari, L. Wang, H. J. Choi, T. D. Chung, N. S. Lu., T. H. Hyeon, S. H. Choi and D. H. Kim, “A graphene-based electrochemical device with thermoresponsive microneedles for diabetes monitoring and therapy”, Nature Nanotechnology, Vol. 11, No. 6, pp. 566–572, 2016. <https://doi.org/10.1038/nnano.2016.38>
- 5) https://www.etri.re.kr/kor/bbs/view.etri?b_board_id=ETRI06&b_idx=16777 (Jan. 6, 2020)
- 6) I. H. Son, J. H. Park, S. Y. Park, K. J. Park, S. I. Ham, J. H. Shin, S. G. Doo, Y. I. Hwang, H. Chang and J. W. Choi, “Graphene balls for lithium rechargeable batteries with fast charging and high volumetric energy densities”, Nature Communications, Vol. 8, No. 1, pp. 1561–1561, 2017. <https://doi.org/10.1038/s41467-017-01823-7>
- 7) C. E. Kehayias, S. Macnaughton, S. Sonkusale and C. Staii, “Kelvin probe microscopy and electronic transport measurements in reduced

- graphene oxide chemical sensors”, *Nanotechnology*, Vol. 24, No. 24, p. 245502, 2013. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/24/24/245502>
- 8) S. J. Won, “Electromechanical behavior of multilayer graphene on polymer substrate”, Korea Advanced Institute of Science and Technology, Theses Ph. D., 2015.
- 9) H. G. Kim, “Evaluation of crack-tip cohesive laws for the Mode I fracture of the graphene from molecular dynamics simulations”, *Computational Structural Engineering Institute of Korea*, Vol. 26, No. 5, p p. 393-399, 2013. <https://doi.org/10.7734/COSEIK.2013.26.5.393>
- 10) M. C. Wang, C. Yan, L. Ma, N. Hu and M. W. Chen, “Effect of defects on fracture strength of graphene sheets”, *Computational Materials Science*, Vol. 54, pp. 236-239, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.10.032>
- 11) P. Zhang, L. Ma, F. Fan, Z. Zeng, C. Peng, P. E. Loya, Z. Liu, Y. J. Gong, J. N. Zhang, X. Zhang, P. M. Ajayan, T. Zhu and J. Lou, “Fracture toughness of graphene”, *Nature Communications*, Vol. 5, p. 3782, 2014. <https://doi.org/10.1038/ncomms4782>
- 12) M. K. Nguyen and Y. J. Yum, “Mode III fracture toughness of single layer graphene sheet using molecular mechanics”, *Transactions of the Korean Society of Mechanical Engineers. A*, Vol. 38, No. 2, p p. 121-127, 2014. <https://doi.org/10.3795/KSME-A.2014.38.2.121>
- 13) C. W. Park, “Electron scattering and localized states at the graphene edge”, Seoul National University, Theses Ph. D., 2012.
- 14) S. W. Kim, C. M. Hwang, T. I. Jang and Y. G. Jung, “Numerical study on hydrogen absorption and expansion behavior on palladium”,

- Transactions of the Korean Hydrogen and New Energy Society, Vol. 18, No. 3, pp. 256-264, 2007.
- 15) H. S. Park, B. J. Lee and S. J. Kim, "A molecular dynamic study of the temperature dependent mechanical properties of graphene", Transactions of the Korean Society of Mechanical Engineers, pp. 36-36, 2013.
- 16) <https://lammps.sandia.gov/> (Jan. 6, 2020)
- 17) W. B. Choi and J. W. Lee "Graphene synthesis and applications", CRC Press, Boca Raton, 2012.
- 18) M. D. Stoller, S. J. Park, Y. W. Zhu, J. H. An and R. S. Ruoff, "Graphene-Based Ultracapacitors", Nano Letters : a journal dedicated to nanoscience and nanotechnology, Vol. 8, No. 10, pp. 3498-3502, 2008. <https://doi.org/10.1021/nl802558y>
- 19) D. Kuang, L. Xu, L. Liu, W. Hu and Y. Wu,, "Graphene-nickel composites", Applied Surface Science, Vol. 273, pp. 484-490, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2013.02.066>
- 20) S. Y. Choi, J. Y. Kim, H. K. Choi, J. H. Kim, C. G. Choi, T. Zyung, "Synthesis, properties and applications of graphene", Electronics and Telecommunications Trends, Vol. 26, No. 3, pp. 61-70, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2014.04.010>
- 21) J. T. Han, S. Y. Jeong, H. J. Jeong, G. W. Lee, "Preparation of chemically exfoliated graphene nanosheets and its applications", Polymer Science and Technology, Vol. 22, No. 2, pp. 137-145, 2011.
- 22) K. S. Kim, Y. Zhao, H. Jang, S. Y. Lee, J. M. Kim, K. S. Kim, J. H. Ahn, P. Kim, J. Y. Choi and B. H. Hong, "Large-scale pattern gr

- rowth of graphene films for stretchable transparent electrodes”, *Nature*, Vol. 457, No. 7230, pp. 706–710, 2009. <https://doi.org/10.1038/nature07719>
- 23) K. R. Lee, “Industrial application of computational nano-science”, Nano-Convergence Foundation, Ministry of Trade, Industry & Energy, 2015.
- 24) S. H. Lee, S. C. Lee, K. R. Lee, “Structural analysis of carbon thin films using molecular dynamics simulation”, *Journal of the Korean Society of Mechanical Engineers*, Vol. 44, No. 3, pp. 70–78, 2004.
- 25) N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenblouth, A. H. Teller and E. Teller, “Equation of state calculations by fast computing machines”, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 21, No. 6, pp. 1087–1092, 1953. <https://doi.org/10.1063/1.1699114>
- 26) A. Satoh “Introduction to practice of molecular simulation”, Elsevier, London 2011.
- 27) S. C. Lee, N. M. Hwang, D. Y. Kim, “Analysis of Material Properties Using Molecular Dynamics”, *Ceramist*, Vol. 3, No. 4, pp. 32–45, 2000.
- 28) J. E. Jones, “On the determination of molecular fields. – II. From the equation of state of a gas”, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, Vol. 106, No. 738, pp. 463–477, 1924. <https://doi.org/10.1098/rspa.1924.0082>
- 29) J. Tersoff, “Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems”, *Physical Review. B. Condensed Matter*,

- Vol. 39, No. 8, pp. 5566–5568, 1989. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.5566>
- 30) S. J. Stuart, A. B. Tutein and J. A. Harrison, “A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions”, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 112, No. 14, pp. 6472–6486, 2000. <https://doi.org/10.1063/1.481208>
- 31) https://lammps.sandia.gov/doc/pair_airebo.html (Jan. 6, 2020)
- 32) https://lammps.sandia.gov/doc/min_style.html (Jan. 6, 2020)
- 33) <https://lammps.sandia.gov/doc/boundary.html> (Jan. 6, 2020)
- 34) S. B. Son, G. D. Kwon, “A molecular dynamics simulation study of hydroxyls in dioctahedral phyllosilicates”, *Journal of the Mineralogical Society of Korea*, Vol. 29, No. 4, pp. 209–220, 2016. <https://doi.org/10.9727/jmsk.2016.29.4.209>
- 35) P. H. Hunenberger, “Thermostat algorithms for molecular dynamics simulations”, *Advances in Polymer Science*, Vol. 112, No. 14, pp. 6472–6486, 2000. <https://doi.org/10.1007/b99427>

부 록 : The command script used in simulation

dimension 3
boundary p s s
units metal
atom_style atomic
newton on
neighbor 2.0 nsq
neigh_modify every 10 check yes
read_data gra.dat
pair_style airebo 1.92
pair_coeff * * CH.airebo C
mass 1 12.0
region Ledge block INF 6.140120 INF INF INF INF units box
region Redge block 330.338 INF INF INF INF INF units box
region notch1 block 7.368144 9.824192 87.207001 98.551003 INF INF units
box
group crack region notch
group left region Ledge
group right region Redge
group boundary union left right
group mobile subtract all boundary
delete_atoms group crack
velocity all create 300.0 5201314 dist gaussian
velocity all zero linear

```

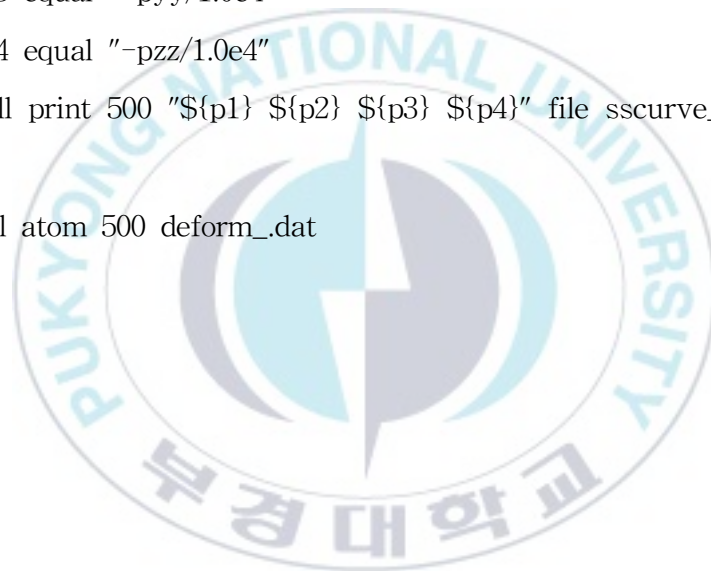
velocity all zero angular
compute myTemp mobile temp
thermo 1000
thermo_style custom step c_myTemp etotal lx ly lz pxx pyy pzz
dump 1 all atom 1000 equil_.dat
min_style cg
minimize 1.0e-15 1.0e-10 10000 10000
velocity boundary set 0.0 0.0 0.0
fix 1 boundary setforce NULL NULL 0.0
fix 3 mobile nvt temp 300.0 300.0 0.1
fix_modify 3 temp myTemp
reset_timestep 0
run 20000
unfix 3
unfix 1
undump 1
variable tmp equal "lx"
variable L0 equal ${tmp}
print "initial length, L0: ${L0}"
reset_timestep 0
fix 1 boundary setforce 0.0 0.0 0.0
fix 3 mobile nvt temp 300.0 300.0 0.1
fix_modify 3 temp myTemp
velocity left set -0.17 0.0 0.0
velocity right set 0.17 0.0 0.0

```

```

thermo_style custom step c_myTemp etotal lx ly lz pxx pyy pzz
variable srate equal 1.0e10
variable srate1 equal "v_srate /1.0e12"
fix 2 all deform 1 x erate ${srate1} units box remap x
variable strain equal "(lx-v_L0)/v_L0"
variable p1 equal "v_strain"
variable p2 equal "-pxx/1.0e4"
variable p3 equal "-pyy/1.0e4"
variable p4 equal "-pzz/1.0e4"
fix def1 all print 500 "${p1} ${p2} ${p3} ${p4}" file sscurve_.dat screen
yes
dump 1 all atom 500 deform_.dat
run 50000

```



감사의 글

감사드릴 분들이 너무나 많지만 모두 언급하기엔 지면의 제약이 있기에, 이 곳엔 무한한 제 마음을 간단히 기록하겠습니다. 먼저, 학부시절부터 석사과정까지 네비게이션처럼 저의 방향을 바른 길로 지도해주신 권오현 교수님 감사드립니다. 또한, 학위논문을 한 단계 더 발전하도록 심사해주신 이의주 교수님, 서용윤 교수님 감사드립니다. 그리고 더 넓은 세계를 바라보도록 알려주신 이동훈 교수님, 케이스별 재해사례지식을 축적하도록 알려주신 장성록 교수님, 자신만의 연구주제에서 전문가가 되도록 알려주신 오창보 교수님, 현장에 필요한 안전인이 되도록 북돋아주신 신성록 교수님, 실무 프로세스와 관련한 시야를 접하게 해주신 이창준 교수님께도 감사드립니다. 행정 업무와 관련해서도 항상 수고 많으신 조교선생님 두 분께도 감사드립니다. FCnD 연구실에도 감사한 분들이 많습니다. 제가 쓸모있는 안전인으로 성장하도록 격려해주시는 모든 선배님께도 진심으로 감사드립니다. 다음으로는 사랑하는 저의 가족 부모님과 동생 심이에게 감사를 전하고 싶습니다. 제가 이 과정을 오기까지, 끝맺기까지, 또 다른 시작으로 나아가기까지 너무나도 많은 기도와 눈물과 헌신과 사랑이 있었습니다. 저의 가정에 건강과 평안과 축복이 늘 가득하길 기도합니다. 그 다음은 저와 함께 걷고 있는 모든 친구들에게 감사를 전합니다. 그리고 부족함 많은 저와 함께해주는 동기들, 후배들에게도 감사를 전합니다. 마지막으로 제가 석사과정 중에 가장 마음에 와닿은 성경 한 구절을 남깁니다. 제가 앞으로 어떤 사람으로 성장할지는 알 수 없지만, 그 모든 것이 결국에 아름답고 행복한 결말이 되도록 즐거운 인생을 살아가겠습니다.

In his hearts human plan his course,
but the LORD establishes his steps. Proverbs 16:9(NIV)