creative commons

COMMONS DEED

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

dCollection

공 학 석 사 학 위 논 문

그래핀 입자 구조 및 체적분율이 구리/그래핀 복합재의 전기적 특성에 미치는 영향

2023년 2월

부 경 대 학 교 대 학 원

안 전 공 학 과

박 준 석

공 학 석 사 학 위 논 문

그래핀 입자 구조 및 체적분율이 구리/그래핀 복합재의 전기적 특성에 미치는 영향

지도교수 권 오 헌

이 논문을 공학석사 학위논문으로 제출함.

2023년 2월

부 경 대 학 교 대 학 원

안 전 공 학 과

박 준 석

박준석의 공학석사 학위논문을 인준함.

2023년 2월 17일

위 원 장 공학박사 박 현 곤 (인)

위 원 공학박사 오 창 보 (인)

위 원 공학박사 권 오 헌 (인)

목 차

1. 서 론 ····· 1

1.1 연구 배경 ····· 1

1.2 연구 목적 ····· 5

2. 이론적 배경 ····· 6

2.1 그래핀의 물성 ····· 6

2.2 RVE 모델의 개요 ····· 8

3. 수치해석 모델 ····· 13

3.1 해석 모델 ····· 13

3.1.1 단일 입자 모델 ····· 15

3.1.2 RVE 모델 ····· 19

3.2 해석 조건 및 방법 ····· 25

4. 결과 및 고찰 ····· 28

4.1 단일 입자 모델의 해석결과 ····· 28

4.2 RVE 모델의 해석결과 ····· 32

5. 결론 ····· 42

참고문헌 ····· 43

Figures

Fig. 1 A unit cell (a) square (b) hexagonal array ····· 9

Fig. 2 RVE of randomly distributed particles ····· 10

Fig. 3 Periodic Boundary Condition ····· 12

Fig. 4 A shape of the graphene platelet(aspect ratio : d/t) ····· 14

Fig. 5 Voltage direction and angle of particle ····· 16

Fig. 6 The angle of the particle at V_f = 0.02, AR = 20 ····· 17

Fig. 7 The volume fraction at the angle of the particle 60°, AR 20 ···· 17

Fig. 8 Algorithm of generation RVE ····· 20

Fig. 9 Types of orientation of particles in RVE models ····· 21

Fig. 10 The aspect ratio of random oriented model(V_f = 0.02) ····· 22

Fig. 11 The volume fraction (AR = 100) ····· 24

Fig. 12 Overview of calculating electrical conductivity ····· 27

Fig. 13 Electrical conductivity by angle of single platelet model ····· 29

Fig. 14 Electrical conductivity according to the V_f and AR at constantly oriented RVE model ····· 33

Fig. 15 Electrical conductivity according to V_f and AR at randomly oriented RVE model ····· 35

Fig. 16 Comparison of the electrical conductivity between randomly oriented and constantly oriented RVE model

at AR 50 & 100 ····· 38

Fig. 17 Comparison of the electrical conductivity between randomly oriented and constantly oriented RVE model at AR 10 & 20 ····· 39

PUKYONG NATIONAL UNIVERSITY
부경대학교

Tables

Table 1 Comparison of properties of copper and monolayer graphene ·· 6

Table 2 Electrical conductivity by angle and aspect ratio of the single platelet model ····· 31

Table 3 Electrical conductivity according to V_f and AR at constantly oriented RVE model ····· 34

Table 4 Electrical conductivity according to V_f and AR at randomly oriented RVE model ····· 37

The Effects on the Electric Property of Cu/Graphene Composites by Graphene Platelets and Volume Fraction

Jun Seok Park

Department of Safety Engineering, Graduate School
Pukyong National University

Abstract

Cu/graphene composites are highly electrical conductivity materials widely used in electric devices. In this paper, the effect of the structural variables of graphene platelets on electrical conductivity in Cu/graphene composite materials was evaluated by finite element analysis. Structural variables are considered for the volume fraction, aspect ratio, platelet angle, and platelet structure. The evaluations were performed in the 2 types of model, which one is a single platelet model, another is RVE model. In the single platelet model, the larger the volume fraction and the closer the angle is to 0°, the higher the electrical conductivity was deducted. And the higher aspect ratio brought about the high electrical conductivity. In the RVE model, graphene platelets are oriented uniformly or randomly in the same direction. There was little correlation between the aspect ratio and electrical conductivity in low volume fractions 0.005 and 0.01. However, the electrical conductivity of the randomly oriented RVE model was high at volume fraction of 0.02 and the aspect ratio 50 and 100. This result show that the increase of volume fraction and aspect ratio forms the conductive network which improves the electrical conductivity of the material in the randomly oriented RVE model with high volume fraction and aspect ratio.

1. 서 론

1.1 연구 배경

최근 전자기기에 관한 산업이 발전함에 따라 기존 재료보다 더욱 우수한 전기적 특성을 가진 재료에 대한 수요가 높아지고 있다. 전기전도성이 뛰어난 기존 재료 중 구리는 전기 및 열 전도도가 높고 가공이 용이하며 저렴한 비용으로 전극, 반도체, 자동차, 전력케이블 등 거의 모든 전기장치에 사용되는 재료이다. 하지만 구리는 내마모성이 낮고 습기와 공기 중 오염물질에 노출되면 쉽게 변색 및 부식이 이루어지며 산화된 구리는 전기가 잘 흐르지 않는 단점을 가지고 있다. 이러한 구리의 단점을 개선하고 기계적, 전기적 특성을 향상시키기 위한 신소재의 개발이 활발히 진행되고 있다. 그래핀은 우수한 기계적, 전기적, 열적, 기타 물리적 특성으로 많은 주목을 받고 있다. 그래핀은 풀러렌, 탄소나노튜브 등과 같은 저차원 탄소 동소체로 탄소 원자 한 개 두께로 육각형의 격자 모양을 이루는 2차원 평면 구조이며 화학적으로 안정하고 잘 구부러지고 얇은 두께에서 높은 투과율을 가진다. 그래핀은 Geim 등[1)]에 의해 흑연으로부터 기계적으로 처음 박리하여 얻어진 이후 제작방법과 물리적 특성 및 응용 분야에 관한 많은 연구가 이루어져 경량 고출력 전력케이블, 플렉시블 디스플레이에 사용되는 차세대 투명전극, 전도성 금속 잉크 등 광범위한 분야에서 활용되고 있다. 특히 기존의 구리에 그래핀을 보강재로 사용한 구리/그래핀 복합재에 대한 연구가 이루어지고 있다. Kim 등[2)]은 그래핀 섬유에 구리를 전기도금하여 구리 와이어에 비해 기계적 강도가 높으면서도 최대 약 10배 이상의 전류용량을 가지는 전력케이블에 대하여 연구하였다. Luechinger 등[3)]은 구리에

그래핀을 2~3중으로 코팅하여 공기 중에서 높은 화학적 안정성을 가지면서 금과 은보다 비교적 저렴한 비용으로 생산 가능한 금속 잉크를 연구하였다. Ahn 등[4]은 구리/그래핀 복합재를 기반으로 투명 전도성 전극을 합성하여 기존의 인듐주석산화물(Indium Tin Oxide) 투명전극에 비해 광학 및 전기적 특성을 높이고 열과 산화에 대해 저항성을 높여 화학적 안정성을 개선하였다. 이처럼 구리에 그래핀을 보강재로 활용하여 전기적, 기계적, 열적, 기타 물리적 특성을 크게 개선할 수 있음을 보여주었다.

하지만 그래핀은 제작방법에 따라 그래핀의 결함 정도, 크기 및 층수의 변화에 따라 물성에 많은 차이를 보이며 복합재료의 전기적 특성에 많은 영향을 미치게 된다. Li 등[5]은 환원된 산화그래핀(Reduced Graphene Oxide nanoplatelets, 이하 'RGO'라 한다)과 고품질 그래핀(High Quality Graphene, 이하 'HQG'라 한다)을 각각 볼밀링(ball-milling) 방식으로 제작한 구리/그래핀 복합재에서 그래핀의 체적분율에 따른 전기전도도의 변화를 연구하여 HQG를 사용하였을 때 순수 구리에 비해 약 8%의 전기전도도 향상을 나타냈지만 HQG에 비해 전기전도도가 낮은 RGO를 이용한 복합재는 전기전도도가 거의 향상되지 못하였음을 보여주었다. Dutkiewicz 등[6]은 볼밀링 후 진공 열압착으로 제조된 구리/그래핀 복합재에서 거칠기에 따른 두 종류의 그래핀이 경도와 전기전도도에 미치는 영향을 평가하였으며 양질의 그래핀을 사용한 복합재가 더 균질한 구조를 형성하여 경도는 약 50% 더 높고 전기전도도는 약 30% 더 낮게 나타났음을 보여주었다. Jagannadham[7]은 전기화학증착법으로 제작한 구리/그래핀 필름의 그래핀 함량과 교반 여부에 따른 복합재료의 전기전도도 변화를 평가하여 체적분율 0.11에서 교반하지 않았을 때 최대 약 19%의 전기전도도 향상을 보여주었다. 이처럼 구리/그래핀 복합재료는 그래핀과 복합재의 제조방법에 따라 그래핀의 물성과 복합재 내에서 그래핀 입자가 형성하는 구조가 달라지

므로 복합재 전체의 전기적 특성에 많은 차이가 나타난다. 따라서 구리/그래핀 복합재료의 전기적, 기계적 특성의 향상과 재료의 안정성을 향상시키기 위하여 그래핀 보강재의 구조, 함량, 형태에 따른 물리적 특성의 변화에 관한 연구가 필요하다. 하지만 그래핀 입자의 크기는 매우 작으므로 실험적 방법을 통해 그 영향을 정량적으로 평가하기가 어렵기 때문에 수치해석에 의한 연구가 시도되고 있다.

구리/그래핀 복합재료를 수치해석학적으로 평가하는 기법은 대표적으로 분자동역학(Molecular dynamics)과 유한요소법(Finite Element Method, 이하 'FEM'라 한다)이 있다. 분자동역학을 이용한 해석은 재료를 원자 단위로 관찰하여 재료의 미시적 거동에 대한 더 자세한 정보를 얻을 수 있지만 복잡한 구조와 상대적으로 큰 스케일의 해석 모델에서는 계산 비용과 효율이 떨어지게 된다. 하지만 FEM을 이용한 해석은 복잡한 구조의 해석에서 효율적인 계산이 가능하여 그래핀 관련 복합재료의 구조에 관한 해석에 많이 이용되고 있다. Dai 등[8]은 그래핀/폴리머 복합재를 3D 단위 셀(unit cell)로 모델링하여 그래핀 입자의 종횡비, 형상, 배향 및 집적 정도가 복합재료의 응력-변형률 곡선, 인장강도 및 탄성 특성에 미치는 영향을 연구하였다. Hussein 등[9]은 이론적으로 최대 물성을 지닌 단층 그래핀과 RGO를 이용하여 제작한 그래핀/에폭시 복합재를 대표체적요소(Representative Volume Element, 이하 'RVE'라 한다)로 모델링하여 복합재료의 기계적 특성과 손상 메커니즘에 미치는 영향을 FEM으로 평가하였다. Elmasry 등[10]은 그래핀/폴리머 복합재의 RVE를 이용하여 그래핀 보강재의 체적분율, 종횡비, 배향이 탄성계수 및 열팽창계수에 미치는 영향을 평가하였다. Manta 등[11]도 그래핀 기반 폴리머 복합재를 단위 셀과 멀티스케일 기법을 이용한 RVE를 이용하여 그래핀 입자 간의 터널링 거리와 체적분율, 종횡비에 따른 전기전도도와 침투 임계값(percolation threshold)의 변화를 평가

하였다. FEM을 이용한 복합재료의 평가는 대부분 기계적 특성을 다루고 있으며 복합재료의 구조에 따른 전기전도도의 평가는 그래핀/폴리머 복합재에 국한되어 있어 구리/그래핀과 같은 금속 기지 기반 그래핀 복합재의 입자 구조에 따른 전기전도도 평가는 미흡하여 이에 관한 연구가 필요한 실정이다.

PUKYONG NATIONAL UNIVERSITY
부경대학교

1.2 연구 목적

복합재료는 같은 재료를 사용하더라도 보강재로 사용된 재료의 함량, 구조 및 형태와 같은 구조적 변수가 재료 전체의 물리적 특성에 많은 영향을 미친다. 따라서 복합재료의 구조적 특성에 관한 연구는 더 큰 스케일에서의 신뢰성 확보에 있어 대단히 중요하다.

본 연구의 대상은 우수한 전기적 성능으로 전자장치에 높은 응용 잠재력을 가지고 있는 구리/그래핀 복합재이다. 구리/그래핀의 전기적 특성 평가는 대부분 실험적 평가방법으로 여러 종류의 구조를 가진 복합재료의 물성을 비교하기 힘들기 때문에 수치해석적으로 접근하였다. 구리/그래핀 복합재료에 대한 수치해석에서 복합재료의 구조에 관한 변수로 그래핀 입자의 체적분율, 종횡비, 형상, 전기장과 이루는 각도, 입자가 이루는 구조가 있다. 선행 연구[8~10]에서 그래핀 복합재의 구조적 변수가 기계적 특성에 미치는 영향을 평가하기 위해 이용한 RVE 모델을 참고하여 본 연구에서는 구리/그래핀 복합재를 RVE로 모델링하여 구조적 변수에 따른 전기적 특성을 FEM으로 평가하였다.

본 연구에서 세부적인 사항은 다음과 같다. 다수의 입자가 무작위로 배치된 RVE 모델에서 입자 하나의 각도가 전기전도도에 미치는 영향을 평가하기 어렵기 때문에 입자 하나로 삽입된 단위 셀로 이루어진 단일 입자 모델을 선행 해석하여 입자의 각도가 복합재료의 전기전도도에 미치는 영향을 참고하여 RVE 모델의 해석결과를 고찰하였다. RVE 모델은 크게 두 종류로 분류하였다. 다수의 입자가 무작위로 배치 및 배향된 모델과 배치는 무작위지만 일정하게 배향된 모델로 구분하여 같은 체적분율과 종횡비일 때 전기전도도의 차이를 평가하였다.

2. 이론적 배경

2.1 그래핀의 물성

그래핀은 탄소 원자가 원자 하나 두께의 층으로 육각 모양으로 배열된 2차원 물질이다. 단층 그래핀의 이론적인 물성은 Table 1에 나타내었으며 전기 및 열 전도도로 전기장치에 가장 많이 사용되는 구리와 비교하여도 굉장히 우수하다. 또한, 1.5×10^4 cm^2/Vs의 전자이동도, 2,600 m^2/g의 비표면적과 약 98% 이르는 투명도로 전기적, 기계적, 열적 및 기타 물리적 특성으로도 우수한 물성을 가지고 있다[12~15].

Table 1 Comparison of properties of copper and monolayer graphene

Type	Copper	Graphene
Electrical conductivity (S/cm)	5.8×10^5	10^8
Elastic modulus (GPa)	1.1×10^2	10^3
Tensile strength (MPa)	2.1×10^2	1.3×10^5
Thermal conductivity (W/m·K)	3.85×10^2	5.0×10^3

하지만 그래핀은 제작 방법에 따라 물성이 상이하다. 그래핀의 제작 방법은 대표적으로 기계적 박리법, 화학적 박리법, 화학기상증착법, 에피택셜 성장법(Epitaxial growth) 등이 있다. 기계적 박리법은 초음파, 볼밀링, 테이프를 이용한 방법 등으로 면과 면 사이 결합이 약한 흑연으로부터 그래핀을 박리하는 방법이다. 높은 품질의 그래핀을 생산하는 방법의 하나지만

대규모로 생산하기 적합하지 않다. 화학적 박리법은 주로 허머스(Hummers) 방법을 이용하며 흑연 용액을 강산으로 산화시킨 후 초음파로 처리하여 산화 그래핀(Graphene Oxide) 형태로 박리하는 방법이다. 환원제나 열처리를 이용하여 일부를 환원시켜 RGO로 만들어 사용하기도 한다. 대량 합성이 용이하며 경제적이지만 산소 작용기와 구조적 결함으로 인해 그래핀의 물리적 특성이 다소 사라지는 단점이 있다. 화학기상증착법은 고온으로 가열한 탄화수소를 금속이나 금속 탄화물 촉매 기판 표면에 반응시킨 후 냉각 과정과 촉매 금속을 식각(etching)하는 과정을 거처 원하는 기판에 그래핀을 전사하여 제작하는 방법이다. 대면적으로 그래핀 층수를 조절하여 대량 생산이 용이한 방법으로 많은 주목을 받는 제작 방법이다. 에피택셜 성장법은 탄소가 포함된 재료를 고온에서 열처리하여 탄소가 결정 표면의 결을 따라 성장하거나 결정 내에 탄소가 표면으로 분리되며 그래핀으로 성장시키는 방법이다. 제작 비용이 많이 소요되며 전기적 특성이 상대적으로 떨어진다.

2.2 RVE 모델의 개요

그래핀을 분산시켜 제작한 그래핀 복합재료는 기지(matrix)와 그래핀 입자가 이루는 결정 구조가 일정하지 않다. 이러한 무작위한 위치와 배향을 가진 입자들이 포함된 복합재료를 수치해석을 통해 효과적으로 평가하기 위해 RVE(Representative Volume Element) 개념이 도입되었다. RVE에 관한 대표적인 정의로 Drugan 등[16]은 거시적으로 재료의 구성과 거동 표현을 충분히 정확한 나타낼 수 있는 가장 작은 체적 요소로 정의했다. RVE는 전체 구조를 이루는 최소 단위에 대한 해석 모델이라는 점에서 단위 셀과 개념이 비슷하지만 무작위한 미세 입자 구조에 대한 개념을 포함한다는 점에서 차이를 보인다. Fig. 1은 사각 배열과 육각 배열에 대한 각각의 단위 셀을 나타내었고, Fig. 2는 무작위 크기와 배열을 가진 혼합물에 대한 RVE 모델의 예를 나타내었다.

일반적으로 RVE는 크기가 커질수록 포함하는 입자의 수와 미시적 구조 요소가 많아지게 되면서 전체적인 모델의 이방성이 감소하고 해석결과의 정확도가 높아지게 된다. 그래핀의 형태는 얇은 판형이기 때문에 그래핀 복합재료의 RVE는 크기에 따른 이방성의 변화가 심하게 나타난다. 하지만 RVE 모델의 크기가 커질수록 계산시간 역시 오래 걸리고 시각화가 어려워지기 때문에 계산비용과 해석의 정확도를 고려하여 모델의 크기를 적절히 설정하는 것이 중요하다. 적절한 RVE 크기를 특정하기 위해 가장 많이 사용된 방법은 같은 구조에 대해 다양한 크기의 RVE를 모델링하여 해석결과를 통계적으로 고찰하는 방법이다. 따라서 본 연구에서는 여러 번의 예비 시험 해석을 통해 적절한 크기의 RVE를 결정하였고 비교적 짧은 계산시간으로 양질의 결과가 도출되도록 하였다.

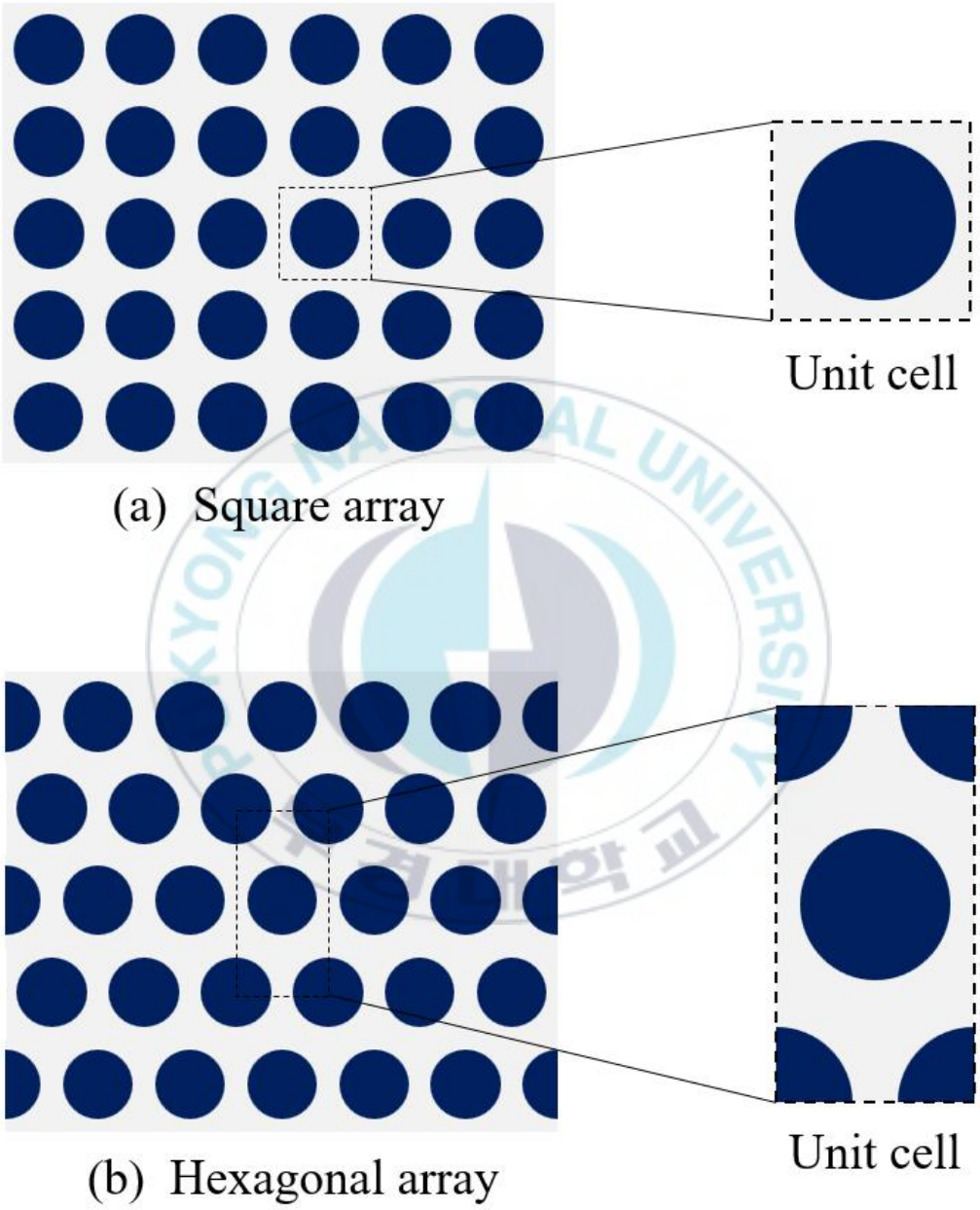


Fig. 1 A unit cell (a) square (b) hexagonal array.

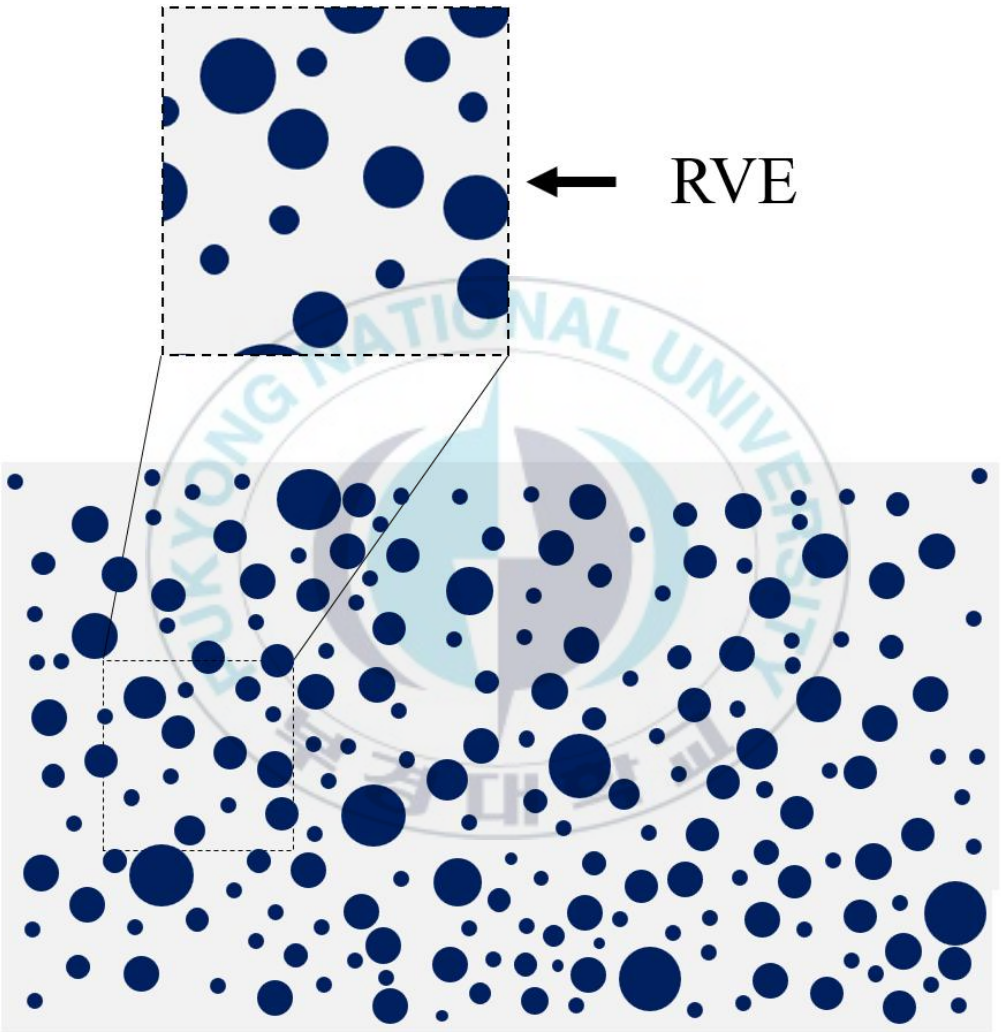


Fig. 2 RVE of randomly distributed particles.

RVE는 재료의 전체 구조 중 일부분의 구조에 대한 해석으로 전체 재료의 물성을 평가하는 방법이다. 모델의 이방성은 크기 효과를 이용하여 제어할 수 있지만 RVE 모델의 크기는 계산 비용과 밀접한 연관이 있기 때문에 모델에 적절한 경계조건을 부여하여 가능한 작은 크기의 모델을 만드는 것이 중요하다. 본 연구에서는 모델에 주기적 경계조건(Periodic Boundary Condition, 이하 'PBC'라 한다)을 부여하여 무한한 크기의 재료를 가정하여 균질화하였다. PBC는 전체 구조의 일부분을 이용하여 전체 구조에 근사하기 위해 자주 사용되는 개념이다. Fig. 3에 나타낸 것처럼 계산하는 체적 밖으로 나가는 입자를 반대쪽에서 다시 유입하는 것으로 해석 주체가 되는 체적 내의 총 입자 개수가 항상 같도록 유지하는 것으로 해석 모델 경계의 의미를 사라지게 하여 해당 구조가 무한으로 확장하는 것으로 균질화할 수 있다.

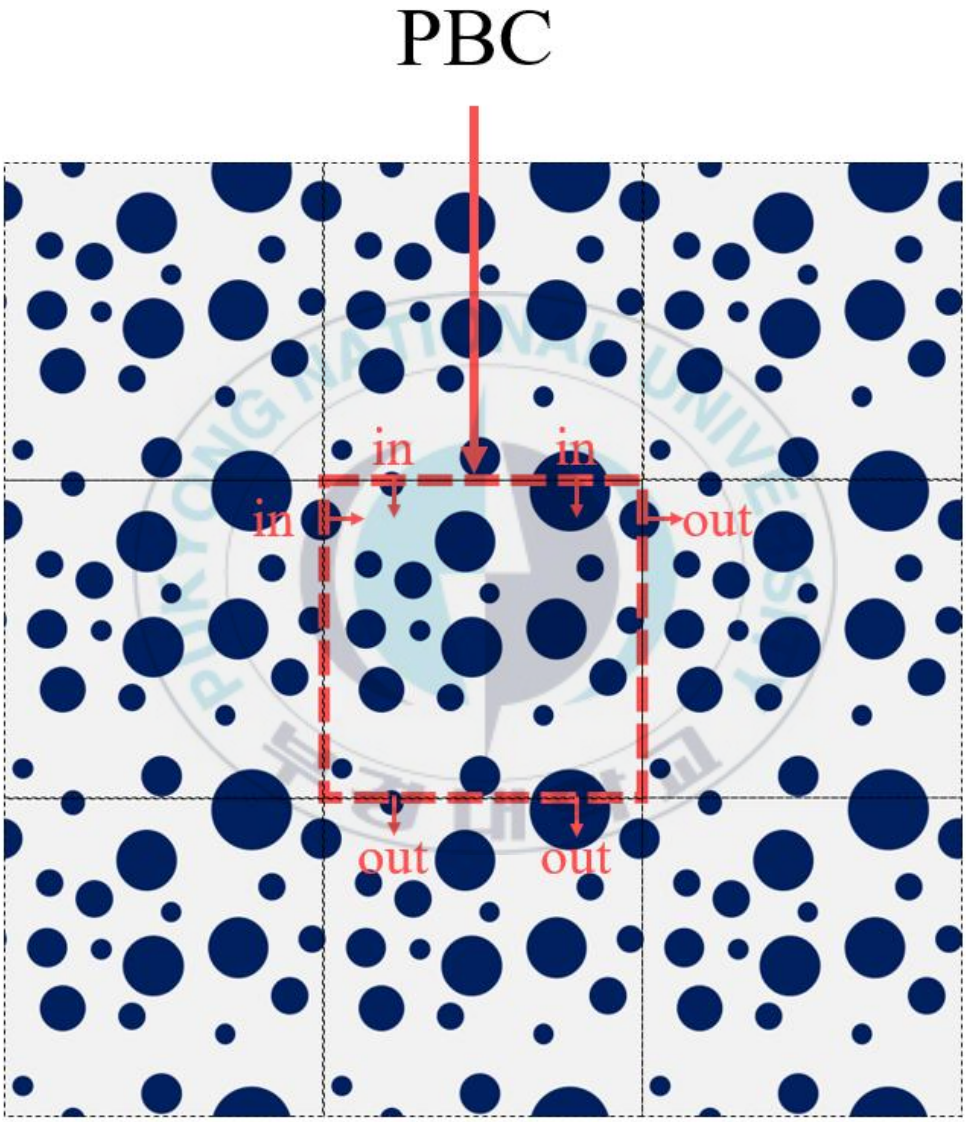


Fig. 3 Periodic Boundary Condition.

3. 수치해석 모델

3.1 해석 모델

복합재료의 구조적 특성은 보강재의 함량, 형태, 입자의 구조에 따라 결정된다. 이 중 함량을 표현하는 방식은 체적분율(V_f)과 질량분율(W_f) 두 가지가 있으며 재료의 밀도를 이용하여 각 분율은 상호변환이 가능하다. 수치해석을 위해 복합재료를 3D로 모델링하는 과정은 체적을 이용한다. 따라서 본 연구에서는 계산 과정이 단순한 체적분율을 이용하였다. 입자의 형태는 선행 연구[8~10]를 참고하여 얇은 원판 모양으로 설정하였으며 체적분율과 종횡비에 따라 입자의 크기를 결정하였다. 종횡비(AR)는 입자의 지름(d)과 두께(t)의 비로 Fig. 4에 자세히 나타내었다. 입자의 구조는 입자 간 구조와 전기장과 입자가 이루는 각도를 평가하였다. 입자 간 구조에 대한 평가는 RVE 모델에서 해석하였다. 하지만 RVE 모델은 다수의 입자가 무작위로 배치 및 배향되어있어 각 입자의 각도가 전기전도도에 미치는 영향을 평가하기 어렵다. 따라서 기지 내에 하나의 입자가 존재하도록 하여 단순화한 단일 입자 모델을 생성하여 입자의 각도에 따른 전기전도도 변화를 해석하였다. 모델의 형태는 정육면체로 입자의 각도의 영향을 평가하기 용이하게 하였다. 모델의 크기는 클수록 해석 결과의 정확도가 높아지지만 해석 시간이 늘어나게 되므로 적절한 크기를 설정하여야 한다. 따라서 예비 해석을 통해 모델의 크기를 3 μm × 3 μm × 3 μm 설정하였다. 다른 변수의 영향을 줄이기 위해 결함이 없는 이상적인 형태로 모델링하였다. 이후 단일 입자 모델에서 입자의 각도에 대한 영향을 중심으로 평가하였고 RVE 모델에서는 입자 간 구조에 대한 영향을 중심으로 평가하였다. 단일

입자 모델은 ABAQUS 프로그램을 이용하여 직접 모델링하였으며 RVE 모델은 Digimat-FE 프로그램을 이용하여 입자의 위치와 배향을 결정하였다.

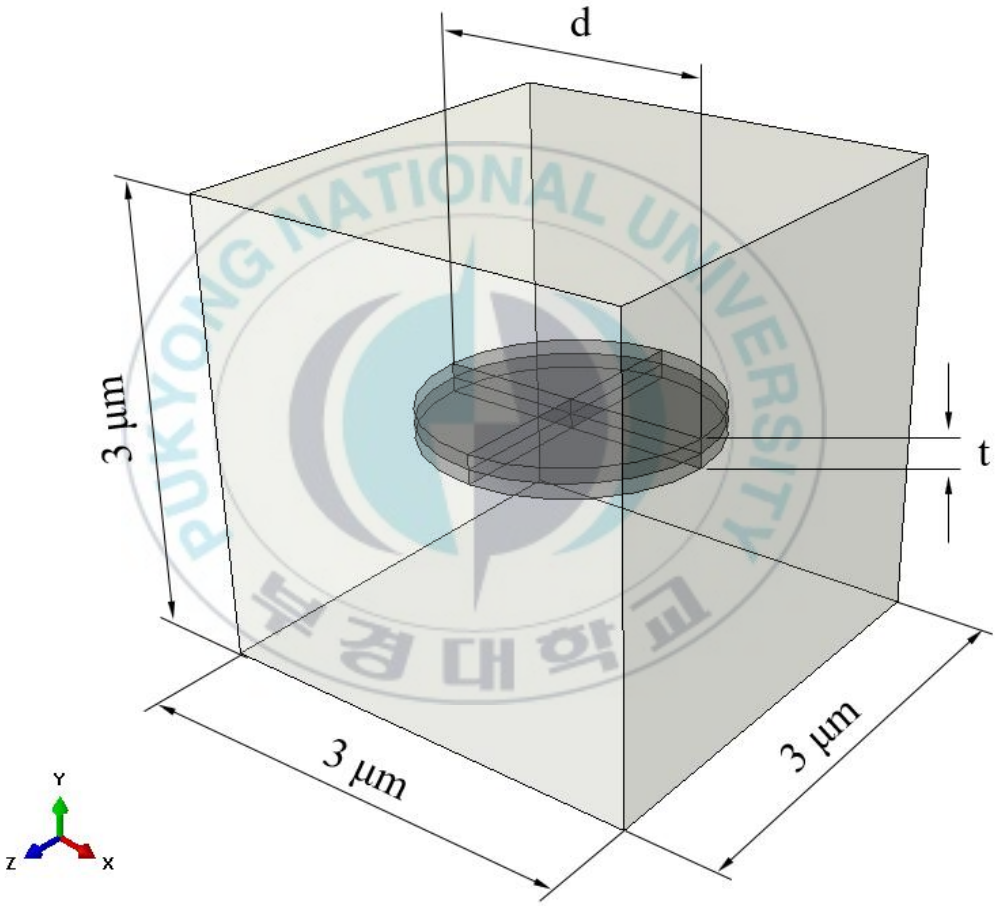


Fig. 4 A shape of the graphene platelet(aspect ratio : d/t).

3.1.1 단일 입자 모델

단일 입자 모델은 체적분율과 종횡비를 이용하여 입자의 크기를 결정하고 입자의 각도를 조절하였다. 그래핀 입자의 체적분율은 0.005, 0.01 및 0.02로 설정하고 각 체적분율마다 종횡비는 5, 10 그리고 20으로 설정하였다. 단위 셀 중앙에 그래핀 입자를 배치하고 전기장과 이루는 각도(θ_i)를 0°, 15°, 30°, 45°, 60°, 75° 및 90°로 설정하였다. Fig. 5에 전압 인가 방향과 입자의 각도를 나타내었다. Fig. 6에 같은 체적분율 V_f = 0.02와 종횡비 AR = 20에서 입자의 각도에 따른 모델의 형태를 나타내었으며 Fig. 7에 종횡비 20과 입자의 각도 60°에서 체적분율에 따른 그래핀 입자의 크기를 나타내었다.

단일 입자 모델은 유한요소해석 프로그램이면서 직접 모델링이 가능한 ABAQUS 상용프로그램을 이용하여 생성하였다. 단일 입자 모델의 모델링을 위해서는 그래핀 입자의 크기를 특정하여 지름 d와 두께 t를 결정하여야 한다. 단위 셀의 체적분율 V_f는 식 (1)과 같이 나타낼 수 있다.

$$V_f = V_g / V_t \tag{1}$$

정육면체인 단위 셀의 한 변을 L로 원통 모양의 그래핀 입자의 지름을 d 두께를 t로 정의하여 그래핀 입자의 체적 V_g과 단위 셀의 체적 V_t을 식 (2)와 식 (3)으로 나타내었다.

$$V_t = L^3 \tag{2}$$

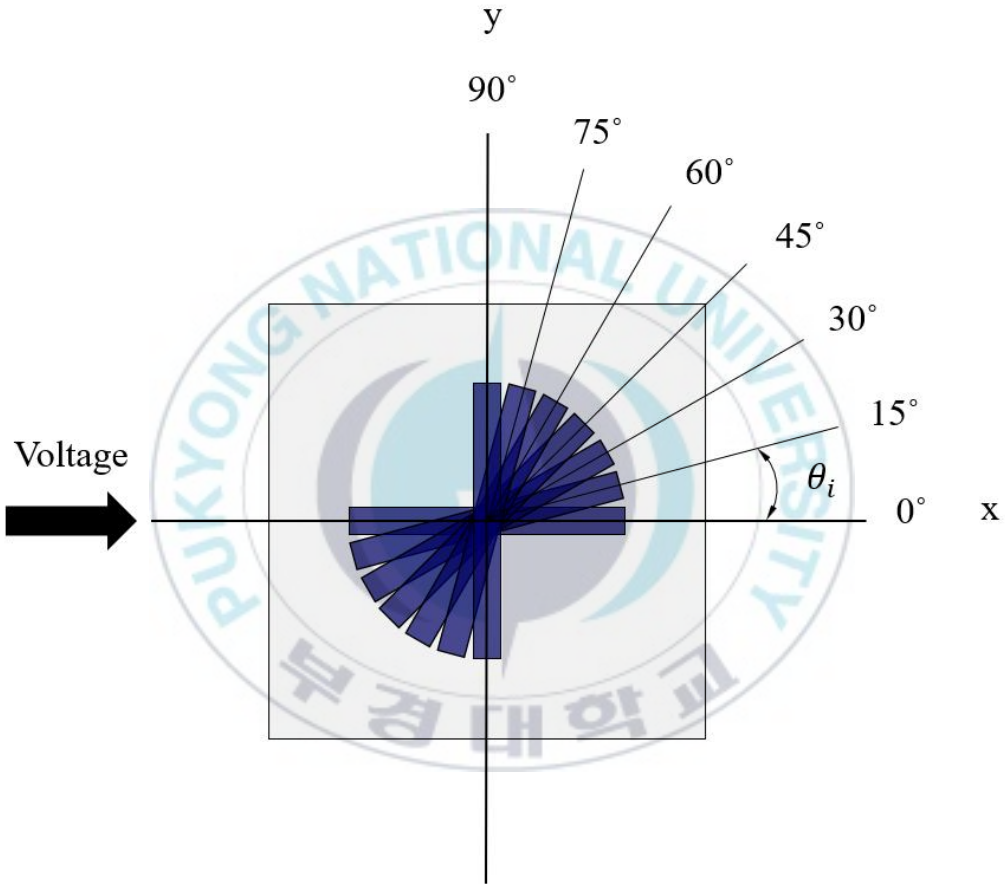
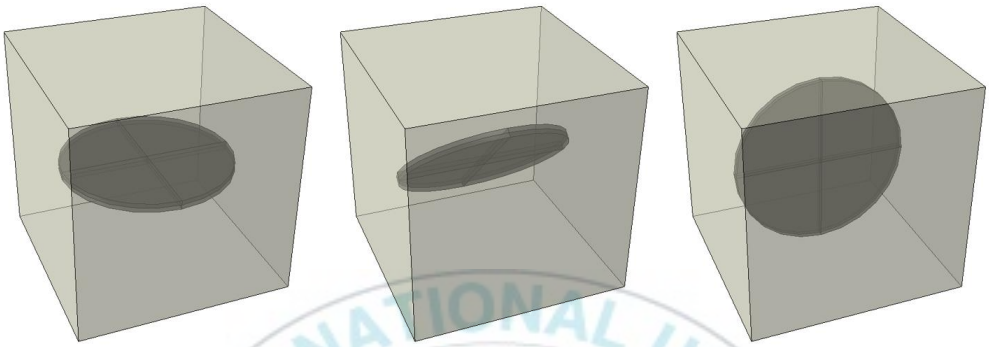
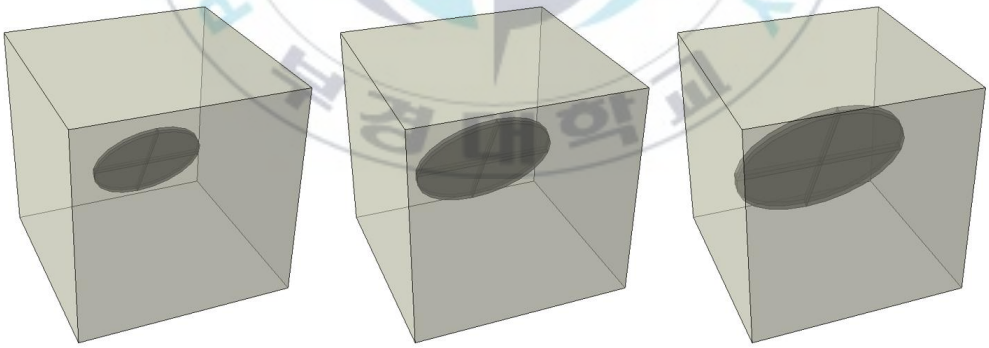


Fig. 5 Voltage direction and angle of particle.



(a) 0° (b) 45° (c) 90°

Fig. 6 The angle of the particle at V_f = 0.02, AR = 20.



(a) $V_f = 0.005$ (b) $V_f = 0.01$ (c) $V_f = 0.02$

Fig. 7 The volume fraction at the angle of the particle 60°, AR 20.

$$V_g = \pi(d/2)^2 t \tag{3}$$

종횡비 AR = d/t을 식 (3)에 대입하여 식 (4)로 나타낼 수 있다.

$$V_g = \pi d^3/4AR \tag{4}$$

식 (2)와 식 (4)를 식 (1)에 대입하여 식 (5)와 같이 나타낼 수 있다.

$$V_f = \pi d^3/4L^3AR \tag{5}$$

식 (5)를 d에 대해 정리하면 식 (6)을 얻을 수 있다.

$$d = \sqrt[3]{\frac{4L^3V_fAR}{\pi}} \tag{6}$$

그래핀은 높은 종횡비를 가지고 있는 재료이지만 그래핀 입자의 각도에 따른 전기전도도의 영향을 효과적으로 평가하기 위해 단위 셀의 형태를 정육면체로 설정하여 종횡비의 제한을 받았다. 단일 입자 모델에서 해석에 이용한 노드(node) 수는 3,420 ~ 3,840개로 RVE 모델에 비해 구조가 단순하여 비교적 적은 수의 노드를 이용하였다.

3.1.2 RVE 모델

RVE 모델은 다수의 입자가 무작위로 배치된 형태로 무작위로 배향한 모델과 전기장과 같은 방향으로 일정하게 배향한 모델로 구분하였다. RVE 모델의 입자 위치와 배향 각도는 Digimat-FE 프로그램을 사용하여 결정하였으며 Fig. 8에 RVE 모델을 생성하는 알고리즘을 나타내었다. 체적분율은 단일 입자 모델과 동일하게 0.005, 0.01 및 0.02로 설정하였다. RVE 모델은 다수의 입자가 삽입되어 각 입자의 크기가 단일 입자에 비해 작아 단일 입자 모델보다 높은 종횡비를 설정할 수 있었다. 각 체적분율마다 종횡비를 10, 20, 50 및 100으로 설정하였다. 또한, 모든 모델에 PBC를 경계조건으로 적용하여 무한한 물질로 상정하여 재료의 거시적인 물성을 계산하였다.

RVE 모델에서 입자의 크기를 결정하기 위해 다음과 같은 과정을 수행하였다. 다수의 입자가 함유된 RVE 모델에서 그래핀 입자의 전체 체적은 식 (4)에서 입자의 개수 γ를 곱하여 식 (7)로 나타낼 수 있다.

$$V_g = (\pi d^3/4AR)\gamma \tag{7}$$

RVE 모델에서 그래핀 입자의 지름 d_{RVE}는 식 (8)에서 얻을 수 있다.

$$d_{RVE} = \sqrt[3]{\frac{4L^3 V_f AR}{\pi\gamma}} \tag{8}$$

Fig. 9는 같은 체적분율과 종횡비에서 입자가 무작위로 배향된 모델과 일정하게 배향된 모델을 나타내었다. Fig. 10은 무작위로 배향된 모델의 체

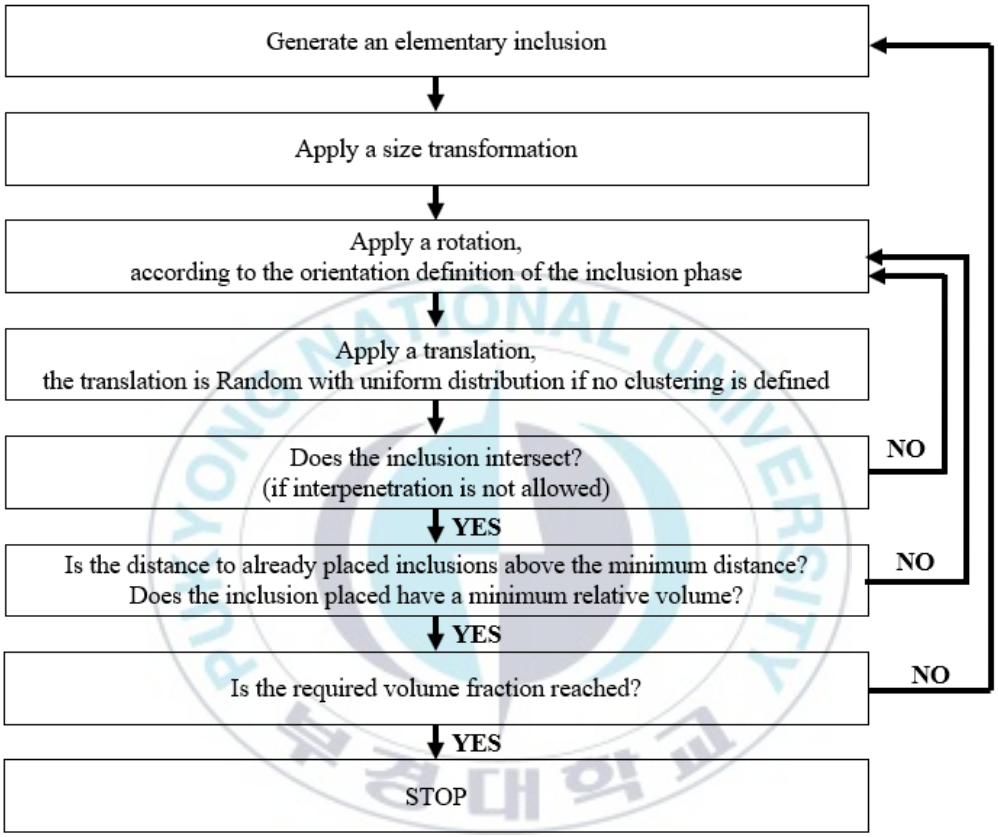
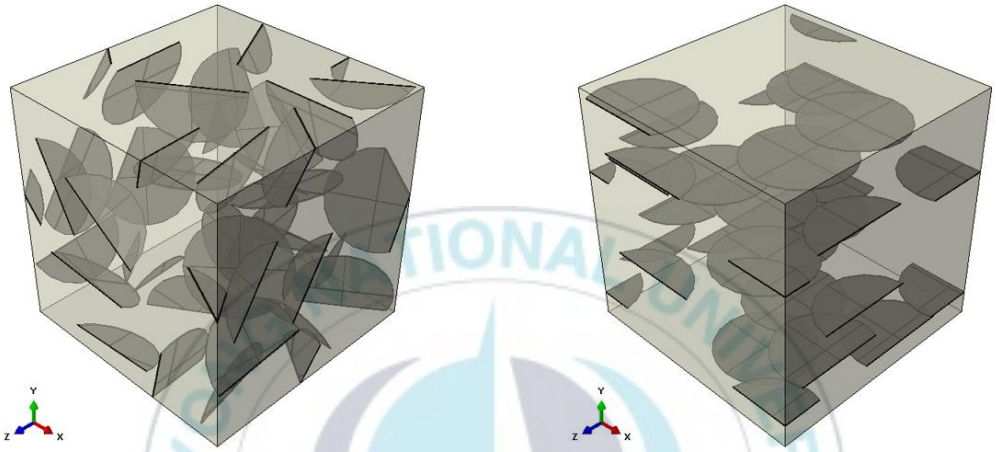


Fig. 8 Algorithm of generation RVE.



(a) Random oridented (b) Constant oridented

Fig. 9 Types of orientation of particles in RVE models.

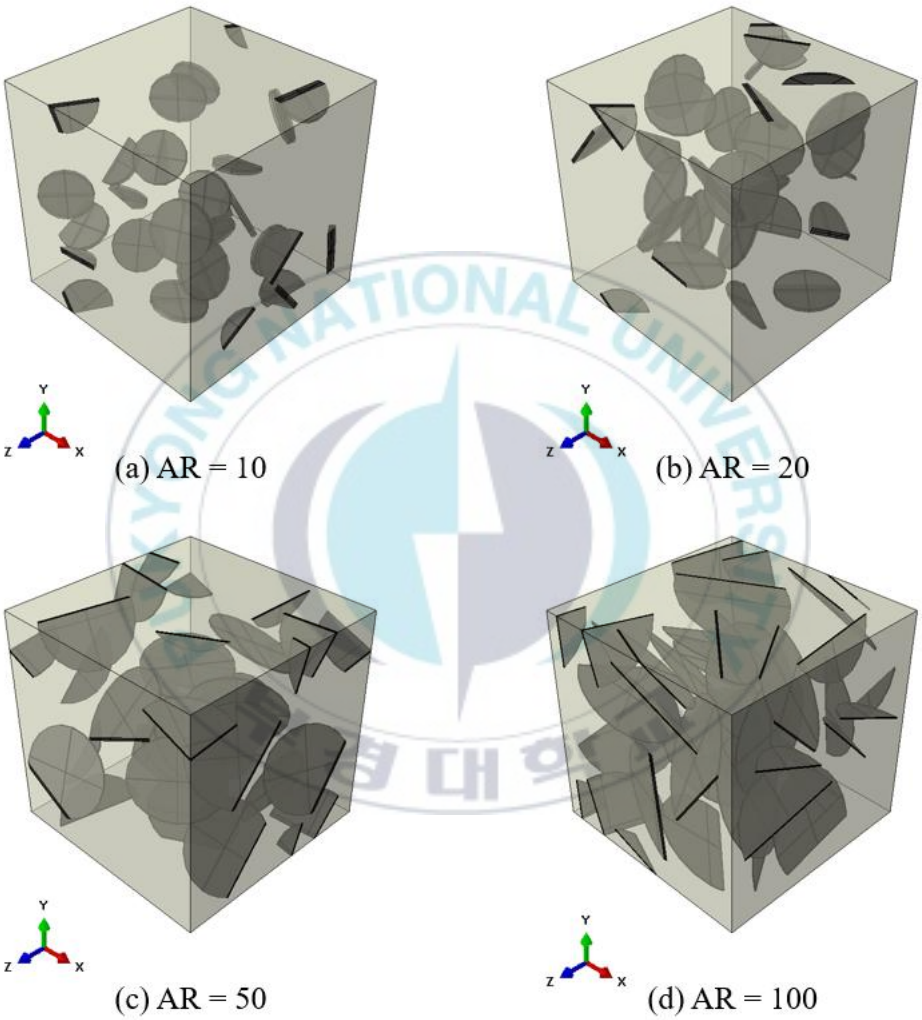


Fig. 10 The aspect ratio of random oriented model(V_f = 0.02).

적분율 0.02에서 종횡비에 따른 모델의 형태이다. Fig. 11은 종횡비 100에서 무작위로 배향된 모델과 일정하게 배향된 모델의 체적분율에 따른 형태를 나타내었다. 해석에 사용된 노드 수는 무작위로 배향된 모델은 363,067 ~ 657,325개, 일정하게 배향된 모델은 385,827 ~ 570,770개로 그래핀의 체적분율과 종횡비가 클수록 모델 구조가 복합하여 정확한 해석결과를 얻기 위해 더 많은 요소가 사용되었다. 단일 입자 모델에 비해서도 약 10배 이상 많은 요소를 사용하여 계산하였다.

PUKYONG NATIONAL UNIVERSITY
부경대학교

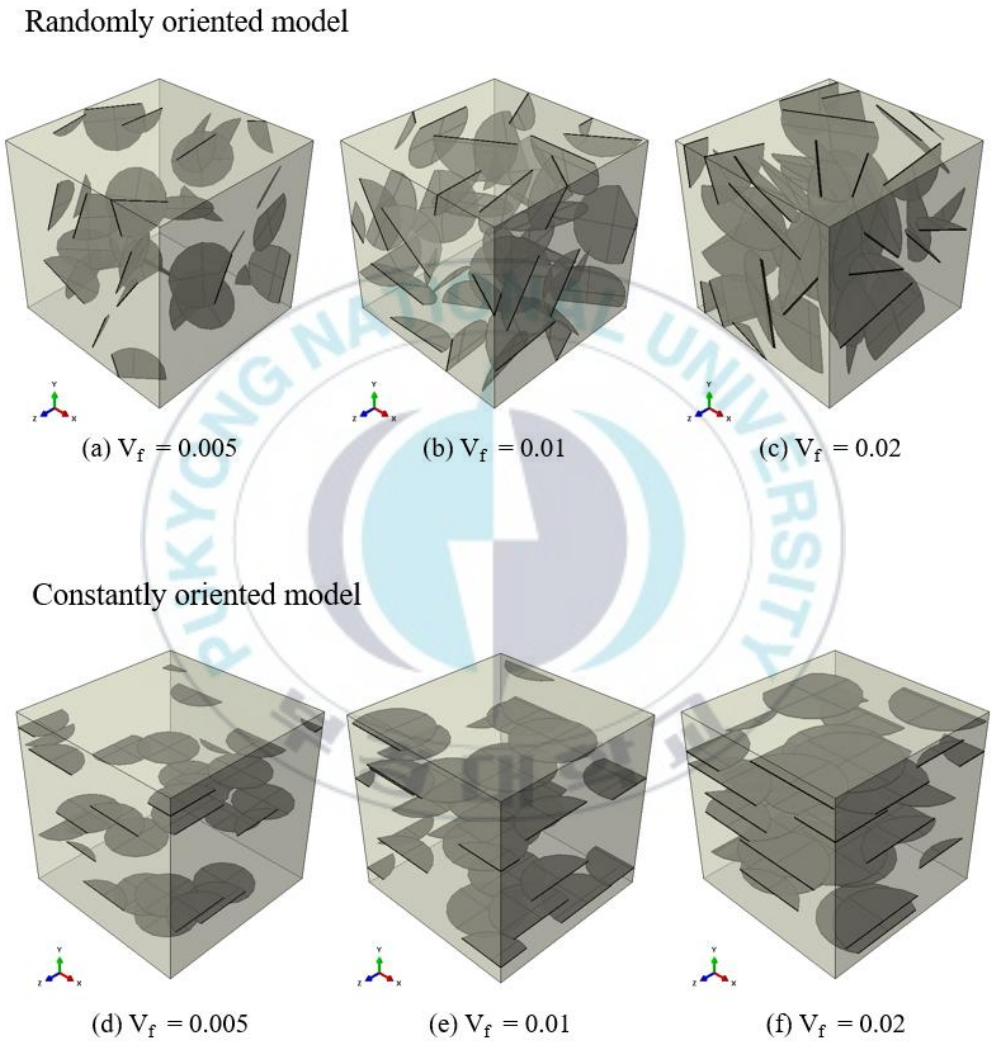


Fig. 11 The volume fraction(AR = 100).

3.2 해석 조건 및 방법

기지재인 구리는 5.8×10^5 S/cm의 전기전도도를 갖는 등방성 물질로 설정하였으며 불필요한 변수를 제거하기 위해 결함이 없는 고품질의 그래핀을 상정하였다. 본 연구의 해석 모델에서 사용된 그래핀 입자의 최소 두께는 0.0083 μm로 단층 그래핀의 두께인 0.00034 μm보다 월등히 두껍다. 따라서 다층 그래핀의 전기전도도 10^6 S/cm[10]으로 해석 조건을 설정하였다. 요소(element)의 종류는 DC3D4E(8-node linear coupled thermal-electrical brick)로 설정하였다.

복합재의 전기전도도의 해석 방법은 모델의 양단에 1 V의 전압을 인가하여 각 요소의 전류밀도 ECD(Electric Current Density)를 도출하고 모델의 끝단에서 전류밀도와 넓이를 적분하여 전류를 계산하고 전류와 가한 전압을 이용하여 저항과 전기전도도를 구한다. Fig. 13에 해석 방법에 대한 개요도를 나타내었다.

각 요소의 전류밀도를 도출하는 지배방정식은 전하 보존방정식을 변형시켜 이용하였다. 평형상태의 직류 전류를 가정하면 전하 보존방정식[17]은 식 (9)와 같이 나타낼 수 있다.

$$-\int_V \frac{\partial\delta\varphi}{\partial x}\cdot\sigma^E\cdot\frac{\partial\varphi}{\partial x}\,dV = \int_S \delta\varphi\, J_a\, dS + \int_V \delta\varphi\, r_c\, dV \qquad (9)$$

여기서 V는 검사 체적(Control volume), S는 검사 체적의 표면적, $\delta\varphi$는 임의의 전위장, φ는 전위, J_a는 S를 통해 들어가는 전류밀도, r_c는 체적당 전하량을 나타낸다. 식 (10)는 식(9)에서 구한 각 요소의 전류밀도 J_a중 모델 끝단의 x축 방향 전류밀도 ECD를 각 요소의 넓이 dS에 대해서 적분하

여 전류 I를 구하는 식을 나타내었다.

$$I = \int ECD \cdot dS \tag{10}$$

비저항이 $\rho(\Omega \cdot cm)$인 임의의 크기를 가진 재료의 저항 $R(\Omega)$은 길이 $L(cm)$에 비례하고 면적 $A(cm^2)$에 반비례하며 식 (11)이나 식 (12)과 같이 표현된다.

$$R = \rho \frac{L}{A} \tag{11}$$

$$\rho = \frac{R \cdot A}{L} \tag{12}$$

전기전도도 σ는 비저항의 역수$(1/\rho)$이므로 식 (12)를 대입하면 식 (13)과 같이 나타낼 수 있다. 여기서 $V(V)$는 전압이다.

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{L}{R \cdot A} = \frac{I \cdot L}{V \cdot A} \tag{13}$$

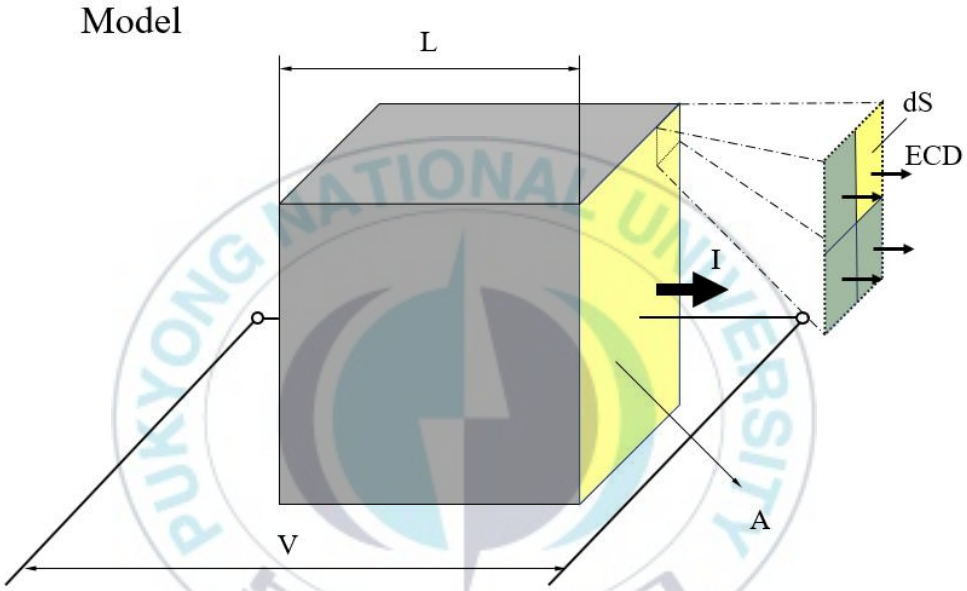


Fig. 12 Overview of calculating electrical conductivity.

4. 결과 및 고찰

4.1 단일 입자 모델의 해석결과

단일 입자 모델에 의해 그래핀 입자의 각도(°), 종횡비(AR), 체적분율(V_f)에 따른 전기전도도의 변화를 평가하여 Fig. 14에 그 결과를 나타내었다. 체적분율을 기준으로 V_f = 0.005에서 전기전도도가 581,287 S/cm ~ 582,021 S/cm, V_f = 0.01에서 582,577 S/cm ~ 584,072 S/cm, V_f = 0.02에서 585,157 S/cm ~ 588,174 S/cm로 나타나 체적분율이 증가할수록 전기전도도가 높음을 알 수 있다. 체적분율이 0.005인 경우 입자 각도가 0°에서 90°로 증가함에 따라 전기전도도는 581,891 S/cm에서 581,411 S/cm로 감소하였으며, 체적분율이 0.01과 0.02에서도 입자 각도가 0°에서 90°로 증가할수록 감소하였다. 또한, 체적분율 V_f = 0.005의 입자 각도 0°에서 종횡비가 5, 10 및 20으로 변화함에 따라 전기전도도가 581,891 S/cm, 581,964 S/cm 그리고 582,021 S/cm로 증가하였다. 하지만 입자 각도 90°에서는 종횡비가 5에서 20으로 증가하는 경우 전기전도도가 581,411 S/cm, 581,336 S/cm 그리고 581,287 S/cm로 감소하였다. 또한, 체적분율이 0.01과 0.02에서도 체적분율 0.005의 결과와 유사하게 입자 각도 0°에서는 종횡비가 5에서 20으로 증가하는 경우 전기전도도가 증가하고 입자 각도 90°에서는 전기전도도가 감소하였다. 따라서 단일 입자 모델에서 그래핀 입자의 체적분율의 증가가 전기전도도 향상에 가장 큰 영향을 미치고 입자가 전기장과 이루는 각도가 증가함에 따라 전기전도도는 감소한다. 또한, 종횡비가 증가함에 따라 입자의 각도에 따른 전기전도도의 변화량이 커지며 체적분율이 증가하면 각도와 종횡비의 변화에 따른 전기전도도의 변화량이 더욱 커진다. 이러한 결과는 그

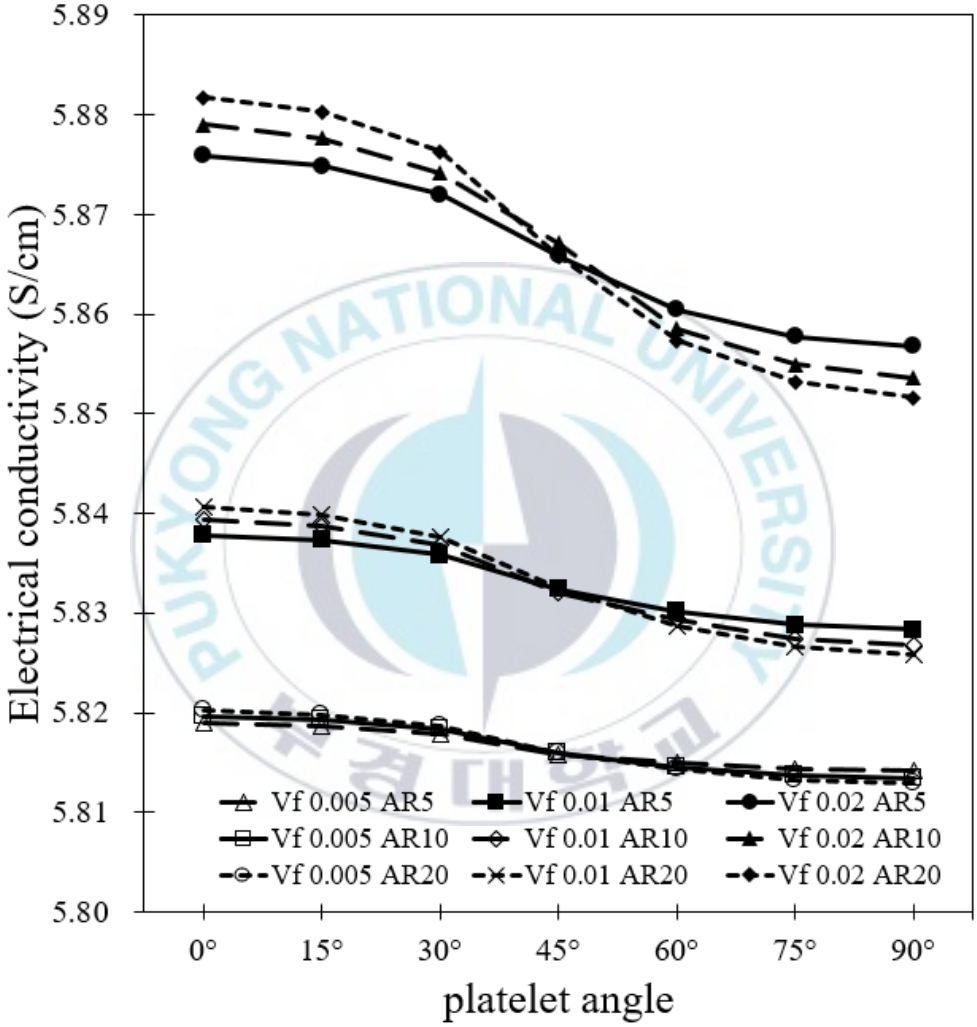


Fig. 13 Electrical conductivity by angle of single platelet model.

래핀 입자가 전기장과 이루는 각도가 증가할수록 전류가 흐르는 경로가 길어져 전기전도도가 감소하게 되며 그래핀 입자의 종횡비가 커지면 입자의 길이가 증가하여 각도에 따라 전류가 흐르는 경로의 길이 변화가 커져 전기전도도의 변화가 커지게 된다. 따라서 체적분율과 종횡비가 크고 입자가 전기장과 이루는 각도가 전기장과 같은 방향인 0°에 가까울수록 단일 입자 모델의 전기전도도가 높아진다. 또한, 구리/그래핀 복합재를 전기장치에 적용할 때 그래핀 입자의 배향과 종횡비가 전기적 성능에 영향을 줄 수 있음을 알 수 있다. Table 2에서 각 변수에 따른 전기전도도의 값을 자세하게 나타내었다.

PUKYONG NATIONAL UNIVERSITY
부경대학교

Table 2 Electrical conductivity by angle and aspect ratio of the single platelet model

Volume fraction	Degree (°)	Aspect ratio		
		5	10	20
		Electrical conductivity (S/cm)		
0.005	0	581,891	581,964	582,021
	15	581,860	581,935	581,978
	30	581,788	581,837	581,868
	45	581,577	581,598	581,588
	60	581,504	581,453	581,434
	75	581,438	581,370	581,329
	90	581,411	581,336	581,287
0.01	0	583,784	583,940	584,072
	15	583,733	583,873	583,989
	30	583,581	583,680	583,769
	45	583,243	583,211	583,257
	60	583,018	582,929	582,869
	75	582,884	582,748	582,,655
	90	582,832	582,68	582,578
0.02	0	587,593	587,904	588,174
	15	587,486	587,766	588,031
	30	587,200	587,414	587,635
	45	586,588	586,717	586,576
	60	586,045	585,856	585,739
	75	585,778	585,498	585,320
	90	585,676	585,360	585,157

4.2 RVE 모델의 해석결과

Fig. 15는 다수의 그래핀 입자를 전기장과 배향은 같고 위치만 무작위로 배치한 RVE 모델의 전기전도도 결과이다. 단일 입자 모델의 결과와 마찬가지로 체적분율이 전기전도도에 지배적인 영향을 나타내었다. 같은 체적분율 내에서 종횡비가 10, 20, 50 및 100으로 변화함에 따라 전기전도도를 비교하였을 때 V_f = 0.005에서 AR = 10일 때 581,827 S/cm, AR = 100일 때 582,065 S/cm로 나타났고, V_f = 0.01에서 AR = 10일 때 583,874 S/cm AR = 100일 때 584,108 S/cm으로 나타났으며, V_f = 0.02에서 AR = 10일 때 588,087 S/cm, AR = 100일 때 588,396 S/cm로 나타났다. 모든 그래핀 입자가 전기장과 같은 방향으로 배향되어있기 때문에 단일 입자 모델의 0°일 때의 결과와 유사하게 종횡비가 높을수록 전기전도도가 높은 경향을 나타내었지만 체적분율의 증가가 전기전도도의 종횡비 대한 차이가 단일 입자 모델에 비해 적게 나타났다. Table 3에 일정하게 배향된 모델에 대한 종횡비와 체적분율의 변화에 따른 전기전도도를 자세하게 나타내었다.

Fig. 16은 그래핀 입자를 무작위로 배향과 배치한 RVE 모델의 체적분율과 종횡비에 따른 전기전도도를 해석한 결과이다. 단일 입자 모델과 일정하게 배향된 RVE 모델의 결과와 같이 체적분율이 전기전도도에 가장 큰 영향을 나타내었다. 같은 체적분율 내에서 종횡비가 10, 20, 50 및 100으로 변화함에 따라 전기전도도를 비교하였을 때 체적분율 0.005에서 AR = 10일 때 581,676 S/cm, AR = 20일 때 582,908 S/cm, AR = 50일 때 581,978 AR = 100일 때 581,917 S/cm로 나타났다. 체적분율 0.01에서 AR = 10일 때 583,874 S/cm, AR = 20일 때 584,242 S/cm, AR = 50일 때 583,945 AR = 100일 때 584,108 S/cm로 나타났다. 입자가 무작위로 배향된 RVE 모델은 입자의 각도가 0°와 90°사이에서 다양한 각도를 가지고 있어 체적

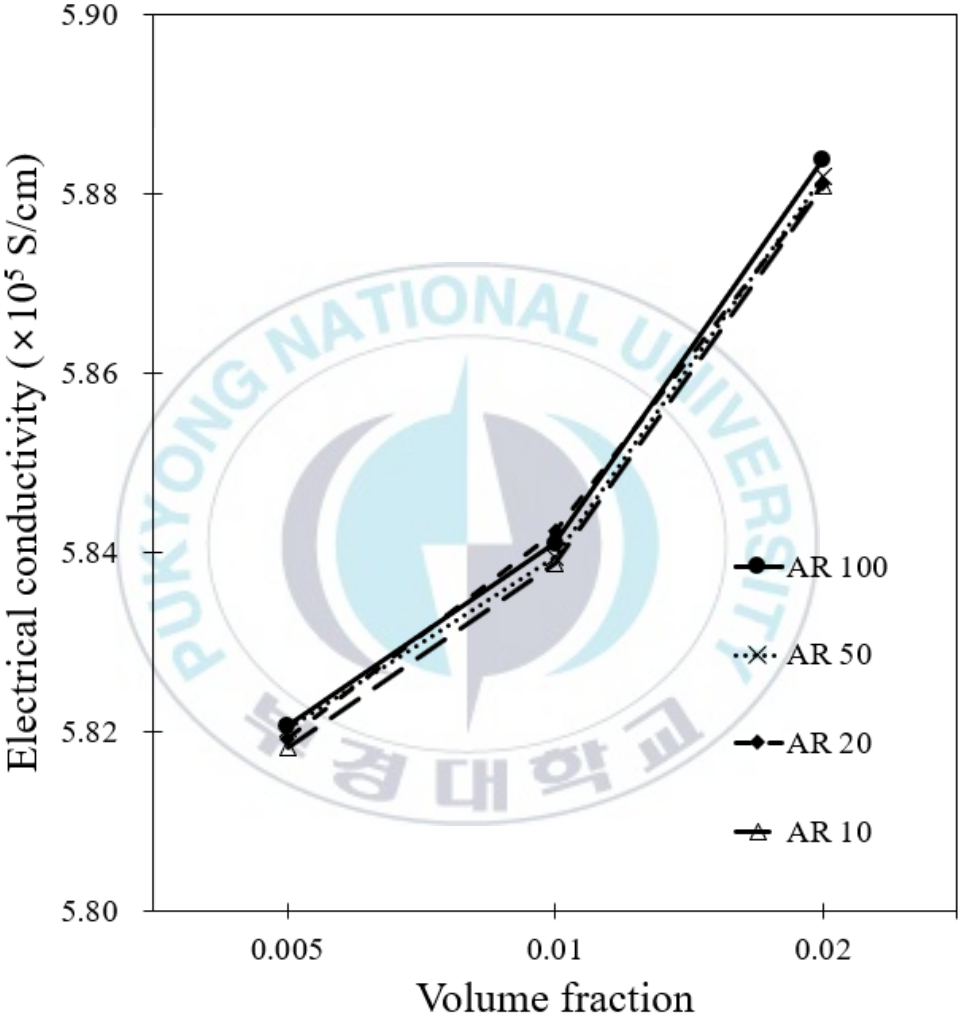


Fig. 14 Electrical conductivity according to the V_f and AR at constantly oriented RVE model.

Table 3 Electrical conductivity according to V_f and AR at constantly oriented RVE model

Volume fraction	Aspect Ratio	Electrical conductivity (S/cm)
0.005	10	581,827
	20	581,922
	50	582,032
	100	582,065
0.01	10	583,874
	20	584,242
	50	583,945
	100	584,108
0.02	10	588,087
	20	588,113
	50	588,206
	100	588,396

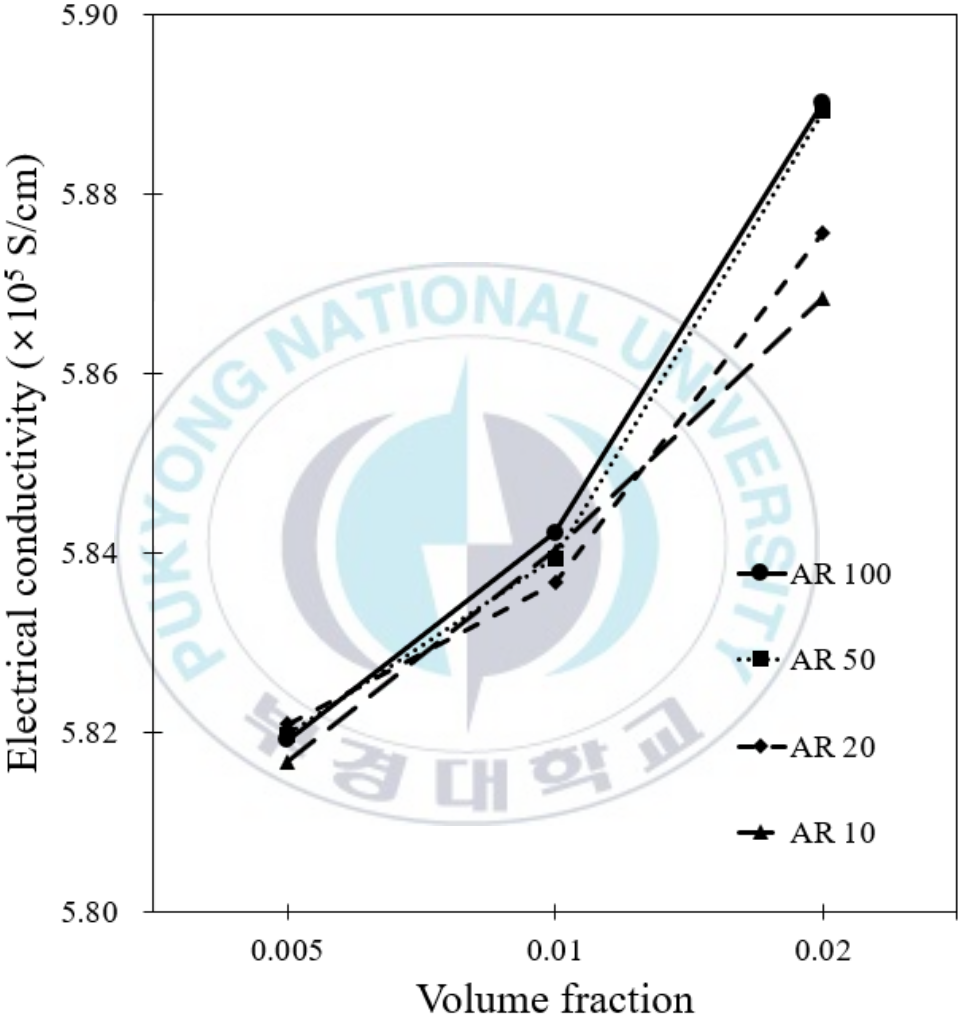


Fig. 15 Electrical conductivity according to V_f and AR at randomly oriented RVE model.

분율 0.005와 0.01에서는 종횡비와 전기전도도 간의 뚜렷한 연관성이 보이지 않았다. 하지만 체적분율 0.02에서 AR = 10일 때 588,087 S/cm, AR = 20일 때 588,113 S/cm, AR = 50일 때 588,206 AR = 100일 때 588,396 S/cm로 일정하게 배향된 모델에 비해 종횡비의 변화에 따라 전기전도도의 차이가 뚜렷하고 크게 나타났다. 이러한 결과는 체적분율 0.02에서 입자의 구조와 관련하여 전기전도도에 영향을 미치는 요소가 발생했음을 나타낸다. Table 4에서 랜덤하게 배향된 RVE 모델의 각 경우에 대한 전기전도도의 값을 자세하게 나타내었다.

입자의 구조가 복합재료의 전기전도도에 미치는 영향을 평가하기 위하여 서로 다른 입자의 구조를 가진 RVE 모델의 결과를 비교하였다. Fig. 17은 종횡비 AR = 50과 AR = 100에서, Fig. 18은 종횡비 AR = 10과 AR = 20에서 입자를 무작위로 배향한 RVE 모델과 일정하게 배향한 RVE 모델의 전기전도도를 비교한 그래프이다. Fig. 17에서 같은 체적분율과 종횡비에서 입자의 구조에 따라 비교하였을 때 체적분율 V_f = 0.005에서는 랜덤하게 배향된 모델의 전기전도도가 일정하게 배향된 모델에 비해 낮게 나타났으며 V_f = 0.01에서는 거의 차이가 없었다. 하지만 비교적 높은 체적분율 V_f = 0.02에서는 랜덤하게 배향된 모델의 전기전도도가 더 높게 나타났다. Fig. 18에서 같은 체적분율과 종횡비에서 입자의 구조에 따라 비교하였을 때 체적분율 V_f = 0.005와 V_f = 0.01 에서는 입자의 구조에 따른 뚜렷한 연관성이 보이지 않았지만 비교적 높은 체적분율 V_f = 0.02에서 일정하게 배향된 모델에 비해 무작위로 배향된 모델의 전기전도도가 더 낮게 나타났다. 단일 입자 모델의 해석결과에서 복합재 내의 그래핀 입자가 전기장 방향에 가깝게 배향될수록 전기전도도가 높게 나타나며 종횡비가 증가할수록 전기전도도 향상 효과가 더욱 커지게 된다. 따라서 무작위로 배치 및 배향된 RVE 모델이 모든 입자가 전기장과 같은 방향으로 배향된 모델의 전기

Table 4 Electrical conductivity according to V_f and AR at randomly oriented RVE model

Volume fraction	Aspect Ratio	Electrical conductivity (S/cm)
0.005	10	581,676
	20	582,098
	50	581,978
	100	581,917
0.01	10	584,034
	20	583,674
	50	583,942
	100	584,224
0.02	10	586,851
	20	587,576
	50	588,930
	100	589,034

PUKYONG NATIONAL UNIVERSITY 부경대학교

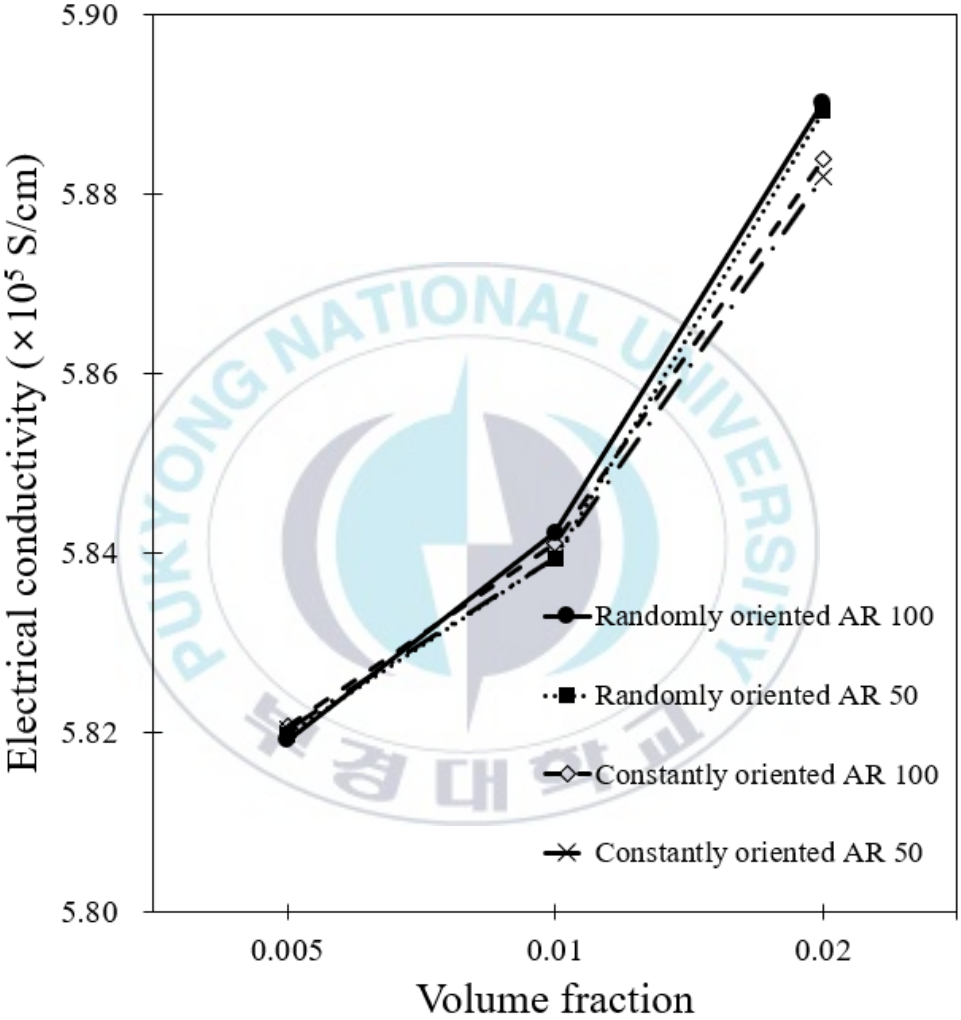


Fig. 16 Comparison of the electrical conductivity between randomly oriented and constantly oriented RVE model at AR 50 & 100.

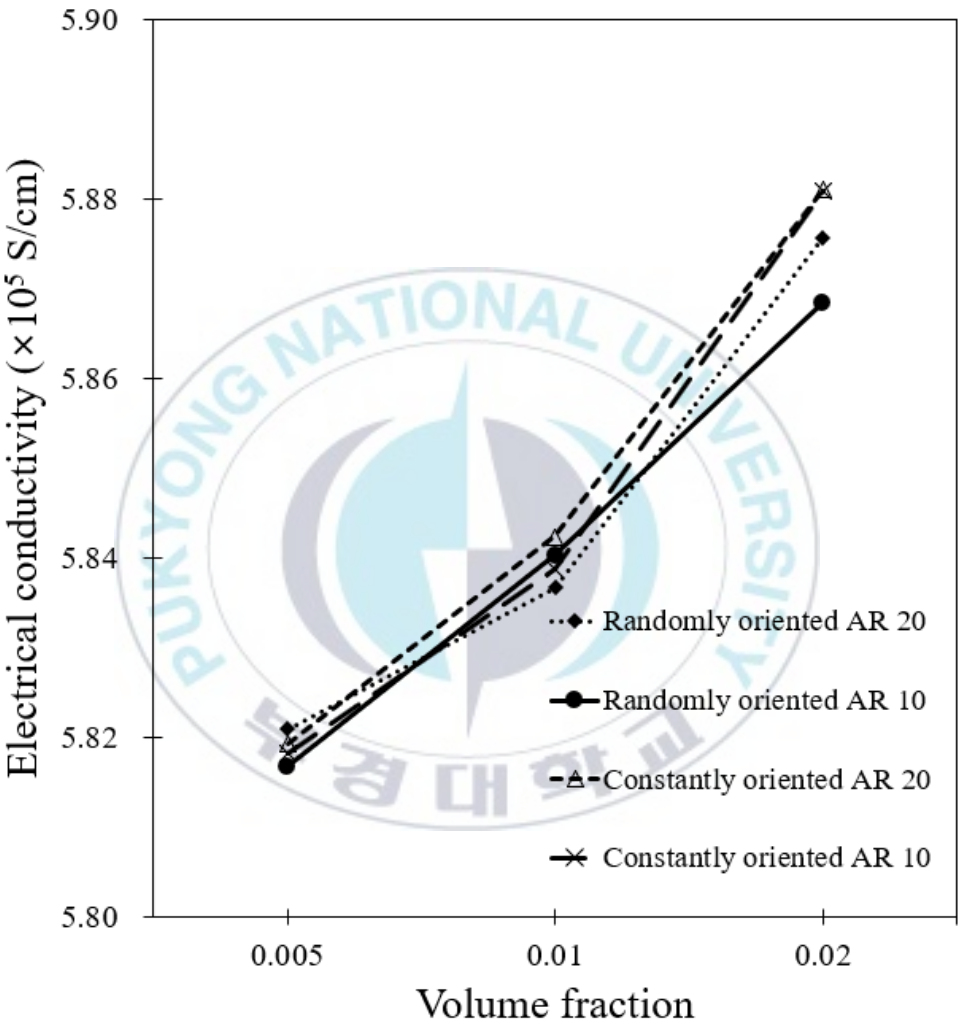


Fig. 17 Comparison of the electrical conductivity between randomly oriented and constantly oriented RVE model at AR 10 & 20.

전도도보다 낮게 나타나야 하며 높은 체적분율과 종횡비에서 그 영향이 뚜렷해져야 하지만 비교적 높은 체적분율 V_f = 0.02와 종횡비 AR = 50, 100에서는 랜덤하게 배향된 모델의 전기전도도가 더 높게 나타났다.

이러한 결과는 선행연구와 비교하여 전도성 네트워크의 영향을 받았음을 알 수 있었다. 전도성 네트워크와 관련한 연구로 Li 등[5]은 구리/그래핀 복합재료를 품질이 다른 RGO와 HQG를 사용하여 각 복합재료에서 그래핀 질량분율이 전기전도도에 미치는 영향을 평가하였다. HQG는 복합재료의 전기전도도 향상에 기여하였으나 결함이 많은 RGO는 전혀 기여하지 못했다. 또한, HQG의 질량분율이 약 1%까지는 증가함에 따라 전기전도도가 순수한 구리에 비해 약 8%까지 향상되었으나 이후 감소하였다. 그 이유로 그래핀 함량의 증가는 전도성 네트워크의 형성에 기여하여 전기전도도가 향상되지만 과도한 함량은 그래핀이 응집되어 골고루 분포되지 못하고 전도성 네트워크의 형성을 저해하며 다량의 공동을 형성하여 오히려 전기전도도가 감소하게 된다고 평가하였다. Manta 등[11]은 절연체인 폴리머가 전도체인 그래핀의 첨가에 따라 전기전도도가 급격히 올라가는 침투 임계값이 전도성 네트워크가 형성되는 지점이며 전도성 네트워크의 형성은 체적분율과 종횡비가 높아질수록 입자 간 거리 및 터널링 거리가 짧아지며 안정적으로 전도성 네트워크가 형성될 확률이 높아진다고 보고하였다. 본 연구와 비교하여 Fig. 17과 Fig. 18에서 나타난 결과는 RVE 모델에서 체적분율과 종횡비의 증가는 입자의 크기를 증가시키고 무작위로 배향된 모델은 일정하게 배향된 모델에 비해 입자의 크기가 증가하게 되면 입자 간 거리가 짧아져 전도성 네트워크를 형성을 더욱 잘 형성하게 되고 전도성 네트워크가 전기전도도의 향상에 기여하기 때문임을 알 수 있었다. 따라서 구리/그래핀 복합재를 전기장치에 응용할 때 낮은 체적분율과 낮은 종횡비에서는 그래핀 입자를 전기장과 같은 방향으로 일정하게 배향하는 것이 유

리하지만 비교적 높은 체적분율과 높은 종횡비에서는 배향보다 전도성 네트워크를 형성하는 것이 유리하기 때문에 입자를 무작위로 배향하는 것이 유리하다. 따라서 구리/그래핀 복합재의 합성에서 그래핀 입자의 높은 함량에서 잘 분산시켜 제작하는 것이 전기전도도 향상에 크게 기여할 수 있음을 알 수 있었다. 본 연구는 그래핀 입자가 응집되지 않는 이상적인 조건으로 해석하여 입자의 군집화와 공동의 생성이 없어 그래핀의 함량 증가에 따른 전기전도도의 감소는 확인되지 않았다. 전도성 재료인 구리 기지 기반 그래핀 복합재료의 해석으로 터널링 거리에 대한 조건은 고려되지 않았다.

PUKYONG NATIONAL UNIVERSITY
부경대학교

5. 결 론

본 연구에서는 구리/그래핀 복합재료에 대하여 단일 입자 모델과 입자 구조가 다른 두 종류의 RVE 모델로 구분하여 해석하였다. 단일 입자 모델에서 체적분율이 전기전도도에 가장 큰 영향을 주며 종횡비가 증가함에 따라 전기전도도의 변화량은 더욱 커진다. 또한, 입자의 각도가 0°에서 90°로 증가함에 따라 전기전도도는 감소한다. 따라서 체적분율과 종횡비가 크고 입자의 각도가 전기장과 같은 방향인 0°에 가까울수록 모델의 전기전도도가 높아진다. RVE 모델의 해석에서 그래핀 입자가 전기장과 같은 방향에 배향된 경우 종횡비가 높을수록 전기전도도는 높은 경향이 나타나지만 그 차이는 작다. 그래핀 입자가 무작위로 배향된 경우 낮은 체적분율에서 종횡비와 전기전도도 간의 뚜렷한 연관을 찾지 못했지만 높은 체적분율에서는 종횡비가 증가할수록 일정하게 배향된 모델에 비해 전기전도도 차이가 크게 나타났다. RVE 모델에서 입자 각도가 일정하게 배향된 모델과 무작위로 배향된 모델을 비교하여 높은 체적분율과 종횡비에서 무작위로 배향된 모델의 전기전도도가 높게 나타났다. 이러한 결과는 RVE 모델의 높은 체적분율과 종횡비에서 그래핀 입자가 무작위로 배향되었을 때 전도성 네트워크의 형성이 더 잘 이루어지며 이는 복합재의 전기전도도의 향상에 크게 기여함을 알 수 있었다. 따라서 구리/그래핀 복합재는 낮은 체적분율과 종횡비에서는 그래핀 입자를 전기장과 같은 방향으로 일정하게 배향하는 것이 유리하고 비교적 높은 체적분율과 종횡비에서는 입자를 무작위로 배향하는 것이 유리하다.

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.

2) 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, “Ultrastrong Graphene-Copper Core-Shell Wires for High-performance Electrical Cables”, ACS Nano, Vol. 12, No. 3, pp. 2803～2808, 2018.

3) N. A. Luechinger, E. K. Athanassiou and W. J. Stark, “Graphene-stabilized Copper Nanoparticles as an Air-stable Substitute for Silver and Gold in Low-cost Ink-jet Printable Electronics”, Nanotechnology, Vol. 19, No. 44, pp. 445201, 2008.

4) Y. Ahn, Y. Jeong, D. Lee and Y. Lee, “Copper Nanowire-graphene Core-shell Nanostructure for Highly Stable Transparent Conducting Electrodes”, ACS Nano, Vol. 9, No. 3, pp. 3125～3133, 2015.

5). W. Li, D. Li, Q. Fu and C. Pan, “Conductive Enhancement of Copper/graphene Composites based on High-quality Graphene”, The Royal Society of Chemistry, Vol. 5, pp. 80428～80433, 2015.

6) J. Dutkiewicz, P. Ozga, W. Maziarz, J. Pstrus, B. Kania, P. Bobrowski and J. Stolarska, “Microstructure and Properties of Bulk Copper Matrix Composites Strengthened with Various Kinds of Graphene Nanoplatelets”, Materials Science and Engineering: A, Vol.

628, pp. 124～134, 2015.

7) K. Jagannadham, “Volume Fraction of Graphene Platelets in Copper-graphene Composites”, Metall. Mater. Trans A, Vol. 44, pp. 552～559, 2013.

8) G. Dai and L. Mishnaevsky, “Graphene Reinforced Nanocomposites: 3D Simulation of Damage and Fracture”, Computational Materials Science, Vol. 95, pp. 684～692, 2014.

9) A. Hussein and B. K, “Micromechanics Based FEM Study on the Mechanical Properties and Damage of Epoxy Reinforced with Graphene Based Nanoplatelets”, Composite Structures, Vol. 215, pp. 266～277, 2019.

10) A. Elmasry, W. Azoti, M. Elmarakbi and A. Elmarakbi, “Interaction Modelling of the Thermomechanical Behaviour of Spatially-oriented Graphene Platelets(GPLs) Reinforced Polymer Matrix”, International Journal of Solids and Structures, Vol. 232, pp. 111183, 2021.

11) A. Manta, M. Gresil and C. soutis, “Predictive Model of Graphene Based Polymer Nanocomposites: Electrical Performance”, Appl. Compos. Mater., Vol. 24, pp. 281～300, 2017.

12) P. H-Manrique, X. Lei, R. Xu, M. Zhou, I. Kinloch and R. Young, “Copper/graphene Composites: a Review”, Journal of Materials Science, Vol. 54, pp. 12236～12289, 2019.

13) M. S. Cao, X. X. Wang, W. Q. Cao and J. Yuan, “Ultrathin Graphene: Electrical Properties and Highly Efficient Electromagnetic Interference Shielding”, J. Mater. Chem. C, Vol. 3, pp. 6589～6599, 2015.

14) S. Stankovich, D. A. Dikin, G. H. B. Dommett, K. M. Kohlhaas, E. J. Zimney, E. A. Stach, R. D. Piner, S. T. Nguyen and R. S. Ruoff, “Graphene-based Composite Materials”, Nature, Vol. 442, pp. 282~286, 2006.

15) R. Nair, P. Blake, A. Grigorenko, K. Novoselov, T. Booth, T. Stauber, N. Peres and A. Geim, “Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene”, Science, Vol. 320, No. 5881, pp. 1308, 2008.

16) W. J. Drugan and J. R. Willis, “A Micromechanics-based Nonlocal Constitutive Equation and Estimates of Representative Volume Element Size for Elastic Composites”, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Vol. 44, No. 4, pp. 497~524, 1996.

17) Abaqus Theory Guide, Abaqus Ver. 6.14 SIMULIA, Inc