

분자역학을 사용한 단층 그래핀 시트의 모드 III 파괴인성<sup>§</sup>

웬민키\* · 염영진\*†

\* 울산대학교 기계공학부

## Mode III Fracture Toughness of Single Layer Graphene Sheet Using Molecular Mechanics

Minh-Ky Nguyen\* and Young-Jin Yum\*†

\* School of Mechanical Engineering, Univ. of Ulsan

(Received July 25, 2013 ; Revised November 4, 2013 ; Accepted December 2, 2013)

**Key Words:** Fracture of Graphene(그래핀 파괴), Mode III Fracture Toughness(모드 III 파괴 인성), Critical Stress Intensity Factor(임계응력확대계수)

**초록:** 단층 그래핀 시트(Single layer graphene sheet, SLGS)의 찢어짐 모드(모드 III) 파괴 예측을 위한 원자 기반 미세결합요소모델이 개발되었다. 이 모델은 그래핀 시트의 최대 변형률 관계를 예측하기 위해 수정된 모스포텐셜을 사용한다. 면외 전단하중 조건에서 그래핀의 모드 III 파괴를 광범위한 분자역학(Molecular mechanics, MM) 시뮬레이션으로 조사하였다. 분자역학은 원자의 균열선단 근처 원자의 변위를 설명하기 위해 사용되었고, 선형탄성파괴역학은 이 영역 바깥의 영역을 설명하기 위해 사용되었다. 해석 결과 분자역학 방법이 SLGS의 전단 물성 계산뿐만 아니라 armchair 및 zigzag 방향 모드 III 파괴인성 연구에도 단순하면서도 신뢰할만하다는 것을 보여준다. SLGS의 모드 III 파괴인성은 zigzag 방향에 대해  $0.86 \text{ MPa}\sqrt{m}$ , armchair 방향에 대해  $0.93 \text{ MPa}\sqrt{m}$  로 예측되었다.

**Abstract:** An atomistic-based finite bond element model for predicting the tearing mode (mode III) fracture of a single-layer graphene sheet (SLGS) is developed. The model uses the modified Morse potential for predicting the maximum strain relationship of graphene sheets. The mode III fracture of graphene under out-of-plane shear loading is investigated with extensive molecular mechanics simulations. Molecular mechanics is used for describing the displacements of atoms in the area near a crack tip, and linear elastic fracture mechanics is used outside this area. This work shows that the molecular mechanics method can provide a reliable and yet simple method for determining not only the shear properties of SLGS but also its mode III fracture toughness in the armchair and the zigzag directions; the determined mode III fracture toughness values of SLGS are  $0.86 \text{ MPa}\sqrt{m}$  and  $0.93 \text{ MPa}\sqrt{m}$ , respectively.

## 1. 서론

그래핀 시트는 하나의 육각형 결정격자에 밀집되어  $sp^2$  탄소원자 결합으로 이루어진 단원자두께 평면시트이다. 그래핀은 그래파이트, 탄소나노튜브, 풀러렌을 포함하는 탄소 동소체의 기본적인 구조 요소이다.<sup>(1)</sup> 단일 탄소-탄소 결합의 중간에 벤젠 링이 연결된 것으로 400 °C 에서 어닐링하여 얻어

지는 그래핀 나노리본<sup>(2,3)</sup>과 그래핀 산화 주름에 플라즈마로 에칭하여 얻어지는 그래핀 산화물 나노리본<sup>(4)</sup>을 제조하는 과정에서 그래핀 시트의 큰 변형과 파괴가 발생한다. 하나 혹은 두 가지  $sp^2$  결합 그래핀 층들의 찢어짐, 접힘, 변형 등은 원자 간력 현미경(Atomic force microscope, AFM)으로 관찰되었다.<sup>(5)</sup> 관찰 결과 육각형 구조 그래파이트가 찢어질 때 깨짐과 접힘이 특정한 방향으로 발생한다는 사실이 확인되었다. 탄소나노튜브의 파괴는 분자역학 시뮬레이션에 의해 연구되었다. 브레너 포텐셜보다 단순한 수정된 모스포텐셜 함수<sup>(6)</sup>에 근거하여 결합이 없는 또한 결합이 있는 탄소나노

§ 이 논문은 대한기계학회 울산지회 2013년도 춘계학술대회(2013. 5. 10., 울산대) 발표논문임.

† Corresponding Author, [yjyum@ulsan.ac.kr](mailto:yjyum@ulsan.ac.kr)

© 2014 The Korean Society of Mechanical Engineers

튜브(CNT) 모델이 개발되었다.<sup>(7,8)</sup> 끝이 가늘어진 그래핀 나노리본 형상의 발견과 일련의 컴퓨터 시뮬레이션을 수행함으로써 다양한 접착강도 하에서 찢어짐 경로의 형상에 대한 초점을 둔 분석을 포함하면서 ReaxFF 분자역학 제 1 원리와 실험연구를 조합함으로써 접착제 기질로부터 그래핀시트 찢어짐의 상향식 조사가 문헌<sup>(9)</sup>에 보고되어 있다.

단일벽 탄소나노튜브(SWNT)의 변형에너지는 분자역학 모델을 사용하여 이론적으로 연구<sup>(10)</sup> 되었고 여기에서는 문헌<sup>(11)</sup>에 제시된 탄소 원자에서  $\pi$ -궤도 방향에 대한 POAV( $\pi$ -orbital axis vector)기술에 바탕을 둔 피라미드화 각도가 원자의 곡률과 관련 있는 전도에너지(Inversion energy) 항을 특징짓기 위해 사용되었다. 분자역학 모델의 단순화 덕분에 SWNT의 평형구조뿐만 아니라 변형에너지의 closed-form 표현이 얻어졌다. Takazumi Kawai 등<sup>(12)</sup>은 그래핀 나노리본(GNR)을 형성하기 위한 그래핀의 기계적 찢어짐에 대한 컴퓨터 시뮬레이션을 수행하였고 원자 모서리 구조를 확인하였다. 시뮬레이션은 armchair 모서리 구조에서 그래핀에 작용하는 전단력 결과는 찢어짐 방향과 무관하다는 것을 분명하게 보여준다. Huang 등<sup>(13)</sup>은 분자동역학 시뮬레이션을 통해 찢어짐 조건하에서의 단일층 그래핀의 파괴 경로를 결정하였다. 이 시뮬레이션 결과는 화학역학적 찢어짐 조건이 찢어짐에 의해 생긴 그래핀 나노리본 모서리 구조에 주된 영향을 미친다는 사실을 밝혀냈다. Shi 등<sup>(14)</sup>의 결과는 그래파이트 내 원자간 육방구조의 평면에서 응력확대계수와  $\sigma$  결합이 관계가 있는 것을 보여준다. 파괴 척도로 원자결합에서 최대 늘어나는 힘을 선택할 때 모드 I 과 모드 II 문제의 파괴인성이 얻어진다.

본 연구에서는 문헌들<sup>(10,14)</sup>와 같은 모델을 찢어짐 모드 하의 SLGS 재료에 적용하려고 한다. armchair(AC) 및 zigzag(ZZ) 방향 그래핀 시트의 모드 III 파괴 거동 효과를 연구하기 위하여 원자 기반 미소결합요소 모델과 그 응용에 대하여 고찰하려고 한다. 이 모델에서는 응력확대계수와 극한 결합변형을 관계를 예측하기 위해 수정된 모스포텐셜이 사용된다. 우리는 단일층 그래핀 시트의 찢어짐에 대해 이론적인 해석을 하고 분자역학 시뮬레이션을 사용하여 찢어진 모서리의 결정학적 방향을 검토한다. 기계적 응력에 의해 유발된 찢어진 모서리는 AC 와 ZZ 방향으로 상당한 거리까지 일직선을 유지한다. 또한 원자 이동에 의한 찢어짐 균열의 진전을 관찰하고 SLGS의 찢어짐 모드

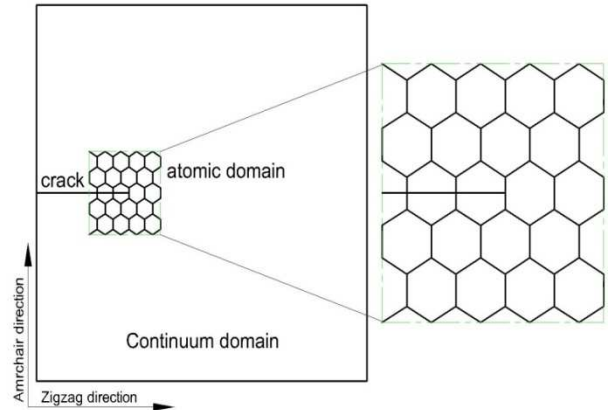


Fig. 1 Schematic of molecular mechanics model

파괴인성을 구하려고 한다.

## 2. 단층 그래핀시트의 분석

### 2.1 분자역학 모델

AC(Armchair) 또는 ZZ(Zigzag) 방향 모서리를 따르는 방향을 가지는 두 가지 일반적인 균열이 Fig. 1에 나타나 있다.

표준분자역학과 분자동역학을 사용하였다. 분자역학을 사용하여 원자간 포텐셜의 합에서 외력에 의한 일을 뺀 에너지를 최소화하는 것으로 모델 시스템의 평형을 생각한다. 분자력장의 개념<sup>(15,16)</sup>에 기초한 분자역학에 의해 분자시스템의 전체 분자포텐셜에너지  $U$ 는 각각의 에너지 항의 합으로 표현된다.<sup>(10,14)</sup>

$$U = U_{\rho} + U_{\theta} + U_{\omega} + U_{\tau} + U_{vdw} + U_{es} \quad (1)$$

여기서  $U_{\rho}, U_{\theta}, U_{\omega}, U_{\tau}$ 는 각각 결합신장, 각도변화, 전도(inversion), 비틀림과 관련 있는 에너지를 나타내고  $U_{vdw}, U_{es}$ 는 각각 Van der Waals와 정전기적 상호작용 에너지를 나타낸다.

작은 변형률을 발생시키는 축하중 조건을 받는 SLGS에서 작은 비틀림에 의한  $U_{\tau}$ , Van der Waals 항  $U_{vdw}$ 와 정전기적 상호작용  $U_{es}$ 는 무시 가능하다. 오직 가장 가까운 원자들 사이의 상호작용만 포함되도록 가정한다. 따라서 식 (1)의 첫 번째 세 항  $U_{\rho}, U_{\theta}, U_{\omega}$ 만 본 연구에서 고려된다. 일반적으로 상호작용하는 입자들 시스템의 포텐셜 에너지는 다음 세 항의 합으로 표현될 수 있다.

$$U = U_{\rho} + U_{\theta} + U_{\omega} \quad (2)$$

그러므로 힘의 장(force field)의 형태로서 조화함수를 사용하면 그래핀 시트 원자  $I$ 의 분자포텐셜

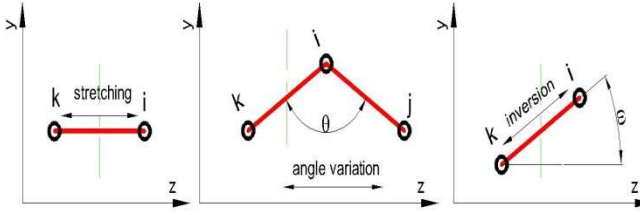


Fig. 2 Schematic diagrams for the potential energy of the three terms

에너지는 다음과 같다.<sup>(10)</sup>

$$U_l = \frac{1}{2}C_\rho \sum_1^3 (l - l_0)^2 + \frac{1}{2}C_\theta \sum_1^3 (\theta - \theta_0)^2 + \frac{1}{2}C_\omega (\omega_k)^2 \quad (3)$$

2.1.1 결합신장(Bond stretching)

수정된 모스포텐셜에 의해 그래핀시트의 포텐셜 에너지는 다음과 같다.<sup>(17)</sup>

$$U_\rho = U_{stretch} = D_e \left\{ [1 - \exp^{-\beta(\Delta l)}]^2 - 1 \right\} \quad (4)$$

여기서

$$\Delta l = l - l_0$$

$l$  : 현재 결합길이

$$l_0 = 1.38 \times 10^{-10} m$$

탄소-탄소 결합의 에너지 파라미터<sup>(14)</sup>는

$$D_e = 6.03105 \times 10^{-19} Nm$$

$$\beta = 2.625 \times 10^{10} m^{-1}$$

결합신장에 의한 포텐셜  $E_{stretch}$  를 추정하기 위해 식 (3)을 현재 결합길이  $l$  에 대해서 미분한다. 원자결합의 분자력장에서 원자결합의 신장력은 다음과 같이 얻어진다.<sup>(10,14)</sup>

$$F = \frac{dU_{stretch}}{dl} = 2\beta D_e [1 - \exp^{-\beta(\Delta l)}] \exp^{-\beta(\Delta l)} \quad (5)$$

여기서  $F$ 는 원자결합의 신장력을 나타낸다. 결합 변형률을  $\varepsilon = \frac{\Delta l}{l_0} = \frac{l-l_0}{l_0}$  로 정의하면, 결합 변형률  $\varepsilon$ 이 음일 때 신장력  $F$ 와 결합변형률  $\varepsilon$ 은 동시에 증가하거나 감소한다. 하지만 결합변형률  $\varepsilon$ 이 양이고 19%보다 클 때는 Fig. 3에 보여주는 것처럼 신장력  $F$ 는 결합변형률이 증가함에 따라 오히려 감소한다.

2.1.2 결합각도(Bond angle)

하나의 원자에 한 쌍의 원자가 결합한 원자들(가운데 같은 원자에 결합) 사이의 각 굽힘 항은

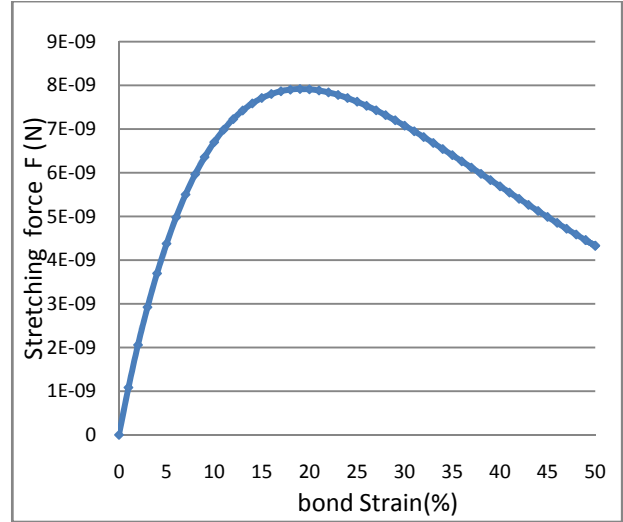


Fig. 3 Relationship between the stretching force F and bond strain  $\varepsilon$

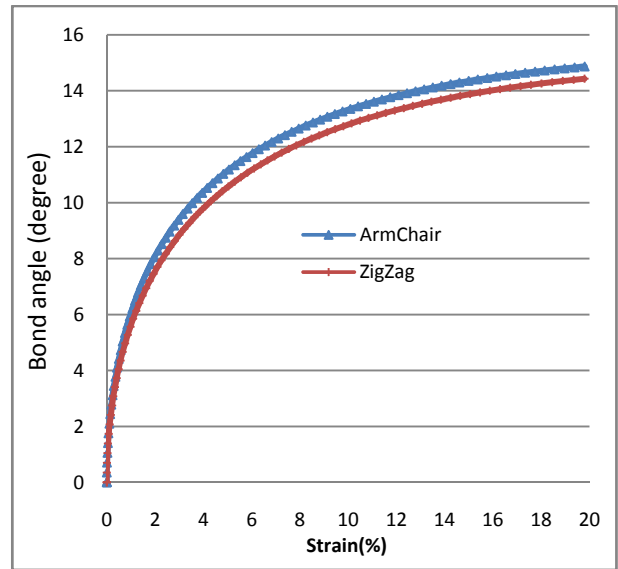


Fig. 4 Relationship between the bond angle and the bond strain  $\varepsilon$

전체 결합각도의 합으로 구해진다. 이 변형을 설명하는 포텐셜 함수의 수학적 표현은 다음과 같다.<sup>(14)</sup>

$$U_\theta = U_{angle} = \frac{1}{2}k_\theta (\theta - \theta_0)^2 [1 + k_{sextic}(\theta - \theta_0)^4] \quad (6)$$

원자결합 모멘트는 식 (6)으로부터 다음과 같이 얻어진다.

$$M(\theta - \theta_0) = k_\theta (\theta - \theta_0) [1 + 3k_{sextic}(\theta - \theta_0)^4]$$

$$M(\Delta\theta) = k_\theta (\Delta\theta) [1 + 3k_{sextic}(\Delta\theta)^4]$$

여기서 파라미터<sup>(14)</sup>는

$$\begin{aligned} \theta_0 &= 2.094 \text{ rad} \\ k_\theta &= 0.9 \times 10^{-18} \frac{\text{Nm}}{\text{rad}^2} \\ k_{\text{sextic}} &= 0.754 \text{ rad}^{-1} \end{aligned}$$

결합각도와 결합변형률에 대한 결과가 Fig. 4에 나와 있다. armchair 방향의 경우 zigzag 방향 경우보다 항상 결합각도가 크고 결합변형률이 19%일 때 결합각도는 각각 14.9°와 14.4°인 것으로 나타났다.

2.1.3 결합전도(면외)

결합전도 외에도 전도에너지가 고려된 해석적인 분자역학 모델은 SLGS의 기계적 성질을 예측하기 위해 다음과 같이 전개된다.<sup>(10)</sup>

$$\begin{aligned} U_\omega &= U_{\text{inversion}} = \frac{1}{2} C_\omega (d\omega_k)^2 \\ M(\Delta\omega) &= C_\omega \Delta\omega \end{aligned} \quad (7)$$

여기서 상수값은 다음과 같다.<sup>(10)</sup>

$$C_\omega = 4.65 \text{ nN nm}$$

결합전도의 결과가 Fig. 5에 보인다. armchair 방향의 경우와 zigzag 방향의 경우 거의 차이가 없었고 결합변형률이 19%일 때 결합각도는 각각 33.2°와 33.1°로 거의 동일함을 알 수 있다.

2.2 문제 서술

Fig. 6(a)에 나타난 것처럼 60개의 탄소원자로 이루어진 사각형 모양의 그래핀 시트가 선택되었다. 찢어짐에 의한 그래핀 모서리의 형상을 보기

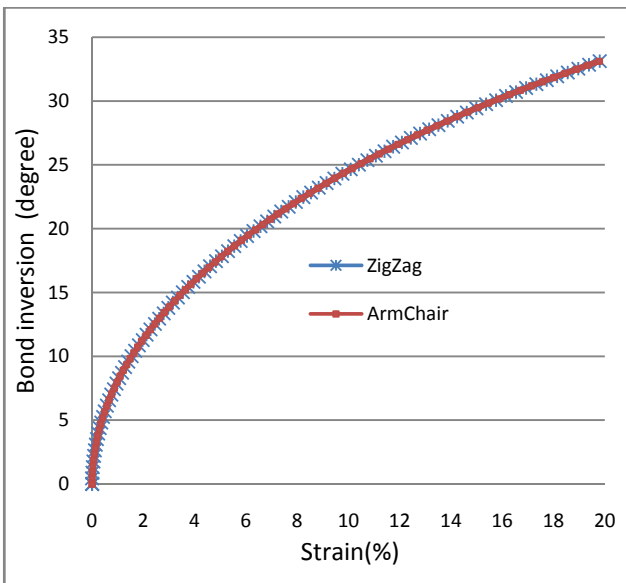
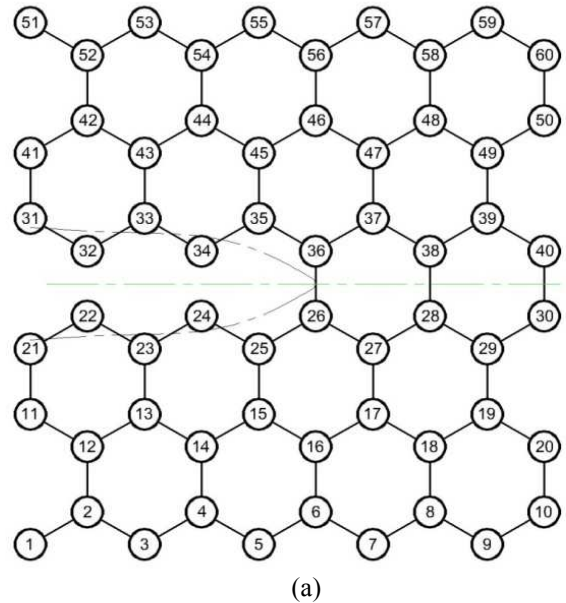


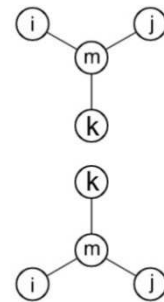
Fig. 5 Relationship between the bond inversion and the bond strain  $\epsilon$

위해 면외 전단력을 적용하였다. 직사각형 모서리들 중 한 개에 전단력을 부과하였다. 그래핀 시트의 찢어짐 변형을 발생시키기 위해 균열 상부와 하부의 원자들은 원래 그래핀 표면에 수직한 방향(z-방향)으로 등속도로 서로 반대방향으로 이동시켰고 그것들은 표면에 평행한 방향을 따라 자유롭게 이동할 수 있다. 그래서 찢어짐 선단에 작용하는 힘은 정확히 표면에 수직하지 않고 유연성을 가지고 있다. 왜냐하면 모서리가 구속된 원자들과 찢어짐 선단 사이의 그래핀 계면은 찢어짐 선단에 작용하는 힘의 방향을 쉽게 바꾸기 때문이다. 특히 찢어짐 현상이 진행된 후 찢어짐 선단이 모서리가 구속된 원자들에서 멀리 떨어져 있을 때 더 그렇다. 찢어짐 모드를 발생시키기 위해 아래에 주어진 모드 III 변위장을 사용한다.<sup>(18)</sup>

$$u_z = \frac{2K_{III}}{\mu} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \sin \frac{\phi}{2} \quad (8)$$



(a)



(b)

Fig. 6 Configuration of a graphene sheet with a crack

여기서

$u_z$ : z방향의 변위

$\mu$  재료의 전단탄성계수;  $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$

E 재료의 탄성계수; E=1.05TPa

$\nu$  푸아송비;  $\nu=0.186$

$K_{III}$ : 모드III 응력확대계수

$$l_{m'iv} = \sqrt{l_{ki}^2 + u_{zki}^2} - (l_{km} + \Delta l_{mk})$$

$$\Delta \omega_{kmi} = \tan \frac{u_{zkm}}{l_{km}} \quad (12)$$

Fig. 6(a)에서 원자 (22-32)와 (24-34) 사이의 결합이 깨진 것이 보이고 이것은 균열을 나타낸다. 균열선단은 (26-36) 결합의 중앙에 위치한다. 원자들(22-32, 24-34)의 거동은 분자역학적으로 해석된다. Armchair 방향을 따르는 찢어짐에서 armchair 모서리 구조를 만들기 위한 하나의 대표적인 깨진 결합(26-36)과 동등 결합(28-38)이 있다. 또한 그래핀에 작용하는 장력은 찢어짐 전면에서 이러한 세 가지 결합(25-26, 26-36, 36-35)에 집중된다. 초기 몇 가지 단계에서 장력은 원자 결합 (26-36)에 집중하여 armchair 모서리 구조를 형성하는데 찢어짐 전면이 그래핀 모서리를 떠나 이동하면서 장력의 집중은 각각 다음 결합(28-38, 30-40,...)에 도달하게 된다. 식 (8)의 모든 변위장은 Matlab으로 수치적으로 풀 수 있다. Fig. 6(b)에 보여준 임의의 원자 n에 대하여 수정된 모스포텐셜 함수는 다음과 같이 쓸 수 있다.<sup>(10)</sup>

$$U^n = U_{stret}^{mi} + U_{stret}^{mj} + U_{stret}^{mk} + U_{angle}^{imj} + U_{angle}^{imk} + U_{angle}^{jmk} + U_{inver}^{imj} + U_{inver}^{imk} + U_{inver}^{jmk} \quad (9)$$

여기서

$U_{stret}^{mi}, U_{stret}^{mj}, U_{stret}^{mk}$  는 각각 세 결합신장  $\Delta l_{mi}, \Delta l_{mj}, \Delta l_{mk}$  에 의한 포텐셜이다.

$U_{angle}^{imj}, U_{angle}^{imk}, U_{angle}^{jmk}$  는 각각 세 가지 결합각도 변화  $\Delta \beta_{imj}, \Delta \beta_{imk}, \Delta \beta_{jmk}$  에 의한 결합각 굽힘 포텐셜이다.

$U_{inver}^{imj}, U_{inver}^{imk}, U_{inver}^{jmk}$  는 각각 세 가지 결합전도 변화  $\Delta \omega_{imj}, \Delta \omega_{imk}, \Delta \omega_{jmk}$  에 의한 면외결합각 포텐셜이다.

결합신장  $\Delta l_{mk}$ , 결합각변화  $\Delta \theta_{kmi}$ , 결합전도 변화  $\Delta \omega_{imk}$  는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\Delta l_{mk} = l - l_0 = \sqrt{l_{mk}^2 + u_{zmk}^2} - l_{mk} \quad (10)$$

$$\Delta \theta_{kmi} = \cos \theta_{kmi} = \frac{(l_{km} + \Delta l_{mk})^2 + (l_{m'iv})^2 - (l_{ki} + \Delta l_{mi})^2}{2(l_{km} + \Delta l_{mk})(l_{m'iv})} \quad (11)$$

$$\Delta l_{mi} = \sqrt{l_{ki}^2 + u_{zki}^2} - l_{ki}$$

### 3. 응력확대계수의 예측

찢어짐 모드의 그래핀시트 MM(molecular mechanics, 분자역학) 모델의 적합성을 향상시키기 위해 단순한 스케일링 방법을 적용하였다. 여기서 스케일링이란 그래핀 시트의 파괴 해석을 위해서 일부분, 즉 균열선단 주위에서의 결합 분리를 고려하는 것으로 대규모 문제를 풀기 위해서 관심 있는 부분의 원자 단위의 계산으로 줄이는 것을 의미한다. 만약 MM 상호작용 포텐셜이 스케일링 없이 사용되면 MM 서브도메인의 강성과 강도의 불일치로 인해 크게 잘못된 결과를 초래하게 된다. 좋은 결과를 얻기 위해서는 반드시 스케일링된 MM 포텐셜을 사용해야 한다.

찢어짐 모드 응력확대계수( $K_{III}$ )는 파괴역학 분야, 특히 선형 탄성 파괴역학에서 핵심 역할을 해왔다. 무차원화된 하중값을 0.005 씩 증가시켜가면서 변위를 점차적으로 100 단계까지 증가시키는 변형 제어 방법을 사용하였다. 각기 적용된 하중에서 정적 평형격자 구조물은 전체 변형에너지 방출률을 최소화하기 위해 계산되고 국부 변형에너지 최소배열이 얻어진다. 계산에서 Fig. 6(a)에 나타난 결합원자 26과 36의 신장력 F는 Fig. 3의 결과로부터  $\varepsilon = 19\%$ 에서 최대값  $F_{max}$ 에 도달한다. 해석 결과 armchair 방향의 경우 85 번째 하중 단계에서 zigzag 방향의 경우 80 번째 하중 단계에서 변형률이 19%에 도달함을 알 수 있었다. 이 후는 양 원자의 위치의 깨지기 쉬운 변화와 일치한다. 첫 번째 결합은 두 원자 사이가 최대로 늘어지면 갑자기 깨지고 그 뒤에 파괴 프로세스를 나타내는 인접한 결합의 붕괴가 동반된다. Fig. 7에 원자 26과 36의 결합 변형률  $\varepsilon$ 과 응력확대계수( $K_{III}$ )간의 관계가 보여진다. 시뮬레이션 결과 하중 방향이 armchair일 때와 zigzag일 때 응력확대계수가 차이가 있음을 보여준다. zigzag 방향과 armchair 방향은 기하학적 구조가 다르기 때문에 변위장이 달라지고 변형률도 다르게 된다. 또한 식 (2)의 결합에너지도 armchair 방향의 경우가 zigzag 방향의 경우보다 크기 때문에 파괴인성치도 크게 된다. 결합이 끊어짐에 의해 유발된 찢어짐 균열은 면외 전단하중방향과 평행한 방향을 따라 진행한다. 임계변형률 값이 19%인 사실로부터 모드 III 파괴인성은 zigzag 방향에 대해  $0.86 MPa\sqrt{m}$

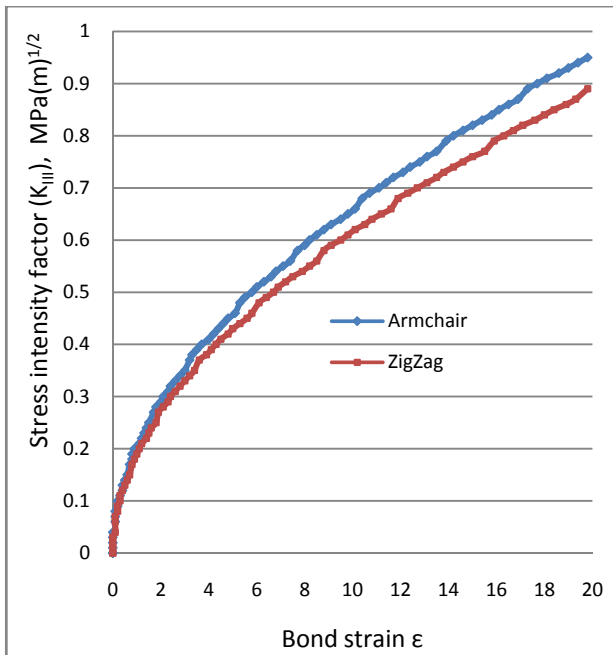


Fig. 7 Relationship between the stress intensity factor ( $K_{III}$ ) and the bond strain  $\epsilon$  (bond: 26-36)

이고 armchair 방향에 대해서는  $0.93 MPa\sqrt{m}$ 인 것을 확인할 수 있다. 그러나 그래핀 시트의 찢어짐 모드 파괴인성치에 대한 문헌이나 결과를 찾을 수 없어서 이 값의 직접적인 비교를 할 수 없다.

#### 4. 결론

단일 층 그래핀 시트가 찢어짐 모드 변형을 받을 때의 파괴거동을 분자역학 방법으로 해석하였다. 그래핀 시트와 같은 탄소 덩어리의 미소 변형을 다룰 때는 단순한 모델이 사용하기 쉽다. 이것은 전도(inversion) 항과 관련이 있는 각도에 의해 특징지어지는 에너지 향이 시트의 변형에너지에서 지배적인 Closed-form 표현으로 나타내지고, 반면에 결합각도 변화에 의한 변형에너지는 큰 곡률이 발생할 때 중요하게 되기 때문이다. 결합각도와 결합전도는 SLGS 를 위한 분자역학에 의해 예측되었다. 본 연구에서 제시한 모델에 의해 예측된 파괴인성은 모스포텐셜에 근거한 MM 시뮬레이션 결과와 비슷하다. 그래핀 층의 깨짐 및 변형 과정을 변위제어 방식으로 MM 시뮬레이션으로 해석하였다. 해석 결과 SLGS 의 하중 방향이 armchair 일 때와 zigzag 일 때 응력확대계수가 차이가 있음을 알 수 있었고 찢어짐 모드 파괴인성은  $0.86 MPa\sqrt{m}$  에서  $0.93 MPa\sqrt{m}$  범위인 것을 확인하였다.

#### 참고문헌

- (1) Xiao, J.-R and Gillespie, J.-W., 2011, "Fracture Behaviors of Graphene Sheets and Carbon Nanotubes," *Physics and Applications of Graphene – Theory*, ISBN 978-953-307-152-7.
- (2) Han, M.-Y, Ozyilmaz, B. and Zhang Y., Kim P., 2007, "Energy Band-Gap Engineering of Graphene Nanoribbons," *Phys Rev Lett*, 98 20,206805.
- (3) Jeon, S.-C and Kim, Y.-S., 2010, "Fabrication of a Graphene Nanoribbon with Electron Beam Lithography Using a XR-1541/PMMA Lift-Off Process," *Transactions on Electrical and Electronic Materials*, Vol. 11, No. 4, pp. 190-193.
- (4) Zhou, X., Qi, X.-Y., Wu, S., Li, H., Boey, F. and Zhang, H., 2009, "A Method for Fabrication of Graphene Oxide Nanoribbons from Graphene Oxide Wrinkles," *J Phys Chem C*, 113:19119.
- (5) Li, L.-X., Liu, R.-P., Chen, Z.-W., Wang, Q., Ma, M.-Z., Jing Q., Li, G. and Tian, Y., 2006, "Tearing, Folding and Deformation of a Carbon-Carbon sp<sup>2</sup>-Bonded Network," *Carbon* 44, 8, pp. 1544-1547.
- (6) Belytschko, T., Xiao, S.-P., Schatz, G.C. and Ruoff, R.S., 2002, "Atomistic Simulations of Nanotube Fracture," *Phys. Rev. B* 65, 235430.
- (7) Xiao, J.-R., Gama, B.-A. and Gillespie, J.-W., 2005, "An Analytical Molecular Structural Mechanics Model for the Mechanical Properties of Carbon Nanotubes," *Int. J. Solids Struct*, 42, pp. 3075-3092..
- (8) Xiao, J.-R., Staniszewski, J. and Gillespie, J.-W., 2009, "Fracture and Progressive Failure of Defective Graphene Sheets and Carbon Nanotubes," *Comp Struct*, 88, pp. 602-609.
- (9) Dipanjan, S., Kostya, S., Novoselov., Pedro, M.-R, and Markus, J.-B., 2010, "Tearing Graphene Sheets From Adhesive Substrates Produces Tapered Nanoribbons," *Small*, 6, No. 10, pp. 1108-1116.
- (10) Shen, L. and Li, J., 2005, "Equilibrium Structure and Strain Energy of Single-Walled Carbon Nanotubes," *Physical Review B* 71, 165427.
- (11) Haddo, R.-C., 1988, " $\pi$ -Electrons in Three Dimensions," *Acc. Chem. Res*, 21, pp. 243-249.
- (12) Takazumi, K., Susumu, O., Yoshiyuki, M. and Hidefumi, H., 2009, "Self-Redirection of Tearing Edges in Graphene: Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations," *Physical Review B*, 80, 033401.
- (13) Huang, X., Yang, H, Adri, C.-T., Jimmy, H. and Zhang, S., 2012, "Chemomechanics Control of Tearing Paths in Graphene," *Physical Review B*, 85, 195453.
- (14) Shi, W., Mu, G. and Li, H., 2008, "Relationship

- Between the Stress Intensity Factors and Bond  $\sigma$  in Graphene Sheet,” *Int J Fract*, 149, pp. 105~111.
- (15) Rappé, A.-K. and Casewit, C.-J., 1997, “Molecular Mechanics Across Chemistry,” *University Science Books*.
- (16) Zhang, H.-W., Wang, J.-B. and Ye, H.-F., 2007, “Influence of Inversion Energy on Elastic Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes,” *Materials Science and Engineering A*, 467, pp. 78–88.
- (17) Tserpes, K.-I. and Papanikos, P., 2007, “The Effect of Stone–Wales Defect on the Tensile Behavior and Fracture of Single-Walled Carbon Nanotubes,” *Composite Structures* 79, pp. 581–589.
- (18) Kundu, T., 2008, “Fundamentals of Fracture Mechanics,” *CRC Press Taylor & Francis Group*.
- (19) Khare, R., Mielke, S.L., Paci, J.T., Zhang, S., Ballarini, R., Schatz, G.C. and Belytschko, T., 2007, “Coupled Quantum Mechanical/Molecular Mechanical Modeling of the Fracture of Defective Carbon Nanotubes and Graphene Sheets,” *Physical Review B* 75, 075412.