

## 나노스케일 분자역학을 이용한 다층 그래핀의 굽힘 탄성거동 예측

김대영<sup>a</sup>, 한석영<sup>b\*</sup>Prediction of Elastic Bending Modulus of Multi-layered Graphene Sheets  
Using Nanoscale Molecular MechanicsDae-Young Kim<sup>a</sup>, Seog-Young Han<sup>b\*</sup><sup>a</sup> Department of Mechanical Engineering, Hanyang Graduate School, 222, Wangsimni-ro, Seongdong-gu, Seoul 133-791, Korea<sup>b</sup> Division of Mechanical Engineering, Hanyang University, 222, Wangsimni-ro, Seongdong-gu, Seoul 133-791, Korea

## ARTICLE INFO

## Article history:

Received	1	June	2015
Revised	8	August	2015
Accepted	12	August	2015

## Keywords:

Molecular mechanics  
Elastic bending modulus  
Finite element (FE) modeling  
Van der Waals Interaction  
Nano scale

## ABSTRACT

In this paper, a description is given of finite element method (FEM) simulations of the elastic bending modulus of multi-layered graphene sheets that were carried out to investigate the mechanical behavior of graphene sheets with different gap thicknesses through molecular mechanics theory. The interaction forces between layers with various gap thicknesses were considered based on the van der Waals interaction. A finite element (FE) model of a multi-layered rectangular graphene sheet was proposed with beam elements representing bonded interactions and spring elements representing non-bonded interactions between layers and between diagonally adjacent atoms. As a result, the average elastic bending modulus was predicted to be 1.13 TPa in the armchair direction and 1.18 TPa in the zigzag direction. The simulation results from this work are comparable to both experimental tests and numerical studies from the literature.

## 1. 서론

꿈의 신소재라 일컫는 그래핀은 탄소원자들로 이루어진 단층으로 된 얇은 막 구조의 물질로 세상에 혜성처럼 등장하게 되었다<sup>[1]</sup>. 그래핀은 강철보다 200배 강한 뛰어난 기계적 강성, 실리콘보다 100배나 빠른 전기 전도도, 열전도 특성 및 광학적 특성을 가지고 있으므로 다양한 응용 분야의 각광받는 소재로 주목을 받고 있다. 그래핀은 단층의 형태, 복층, 다층 및 벌크 형태의 그래파이트의 형태로 물질로 존재할 수 있다.

이러한 다양한 재료적 우수성을 가진 그래핀의 응용분야는 반도체, 플렉시블 디스플레이 필름, 투명전극, 초경량 고강도 복합소재,

태양광 전지, 이차전지 등 매우 다양한 분야에 걸쳐 있다. 이러한 다양한 응용 재료로 사용하기 위해서 매우 작은 크기와 물리적 성질의 우수성, 탄소의 독특한 육각형 형태의 원자 배열로 이루어진 그래핀의 굽힘 탄성계수, 푸아송 비 및 전단계수 등 그래핀의 기계적 특성을 이해하는 것이 매우 중요한 과제이다. 이를 위해 많은 논문들이 다양한 접근 방법으로 그래핀의 기계적 특성을 연구하여 왔고 관련된 많은 논문들이 발표되어 왔다<sup>[2-6]</sup>.

연속체이론(continuum approach)를 기반으로 원자모델링(atomistic-continuum modeling)을 사용하여 집중하중(point loading)이 작용하는 원형 및 사각 그래핀 시트(single layer graphene sheet)에 대한 굽힘 거동에 대해서 연구를 수행하여 굽

\* Corresponding author. Tel.: +82-2-2220-0456

Fax: +82-2-2220-2299

E-mail address: syhan@hanyang.ac.kr (Seog-Young Han).

힘 강성 계수 값이 1.80~1.83 TPa이라는 결과를 얻었다<sup>[7]</sup>. 그러나 이 방법은 단층 그래핀(single layer graphene)에 대한 연구 결과를 보여 주고 있다.

실험적 방법을 통하여 좁고 긴 그래핀에 대해 중간 지점에 집중 하중을 가해 굽힘 강성계수 값이 ~ 7 TPa 이라는 연구 결과를 발표한 사례도 있다<sup>[8]</sup>. 그러나 이 결과는 좁고 긴 경우에 해당하는 경우이지만 결과 값이 일반적으로 다른 결과들과 비교했을 때 유효하지 않은 결과를 나타내고 있다.

또한 분자동역학(molecular dynamics) 시뮬레이션을 통하여 굽힘 강성 계수 값이 0.915~0.366 TPa, 평균 1.034 TPa이라는 결과를 얻었다<sup>[9]</sup>. 그러나 이 방법 역시 단층 그래핀 시트(single layer graphene sheet)에 대해서 수행한 연구 결과이다.

본 논문의 목적은 분자역학(molecular mechanics)을 바탕으로 하여 유한요소법을 활용한 수치해석을 통해 탄소 원자간 비결합 에너지(non-bonded)를 고려하여 다층(multi layered graphene sheet) 및 두께의 변화에 따른 이방성 재료의 특성을 가진 사각형 그래핀의 굽힘강성계수(elastic bending modulus) 거동예측에 관한 연구를 수행하였다. 기존의 원자모델링 기법이나 분자동역학 모델링 기법은 시간과 비용이 비교적 많이 소요되므로 효율적인 유한요소법을 활용하여 대표적인 기계적 특성인 굽힘 강성 계수를 예측할 수 있는 수치해석 모델을 제안하였다. 본 모델의 수치해석 결과에 대해 기존의 해석 및 실험적 연구 결과와 비교함으로써 본 논문의 신뢰성을 확보하고자 한다.

## 2. 본 론

본 연구의 이론적 배경은 분자역학 이론과 유한요소 이론과의 접목으로 강성 등 기계적 특성을 계산하는 방법을 제시하고자 한다.

### 2.1 분자역학이론

탄소 원자는 서로 공유결합으로 연결되어 있다. 외력이 가해질 때 각 탄소 원자들 간의 변위가 발생하는데 이 변위는 탄소 원자 간의 공유 결합력에 의해 구속되어 진다. 그래핀 시트의 기계적 거동을 예측하기 위한 도구로 분자역학 이론을 적용하였다. 일반적으로 전체 시스템의 포텐셜 에너지(total system potential energy)는 다음과 같은 형태로 표현될 수 있다.

$$V = \Sigma V_R + \Sigma V_\theta + \Sigma V_\psi + \Sigma V_\omega + \Sigma V_{vdw} + \Sigma V_{es} \quad (1)$$

여기서,  $V_R$ 은 결합 신축에너지(bond stretching energy),  $V_\theta$ 는 결합각 굽힘 에너지(bond angle bending energy),  $V_\psi$ 는 이면각 비틀림 에너지(dihedral angle torsion energy),  $V_\omega$ 는 역향 에너지

(inversion term energy),  $V_{vdw}$ 는 반데르발스 에너지(van der Waals energy),  $V_{es}$ 는 전기적 에너지(electrostatic energy)를 의미한다. 공유결합 시스템에서는 전체 시스템의 포텐셜 에너지의 처음 4개항이 주요하게 영향을 미치게 된다. 미소 변형에서 간단한 조화항을 채용함으로써 다음과 같은 형태의 에너지 식을 나타낼 수 있다.

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (r - r_0)^2 = \frac{1}{2} \sum_i k_r (\Delta r_i)^2 \quad (2)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2} \sum_i k_\theta (\Delta \theta_i)^2 \quad (3)$$

$$U_\tau = U_\psi + U_\omega = \frac{1}{2} \sum_i k_\tau (\Delta \phi_i)^2 \quad (4)$$

여기서,  $U_r$ 은 결합 인장 에너지,  $U_\theta$ 는 결합 각 굽힘 에너지,  $U_\tau$ 는 이면각 비틀림 에너지를 나타내며,  $\Delta r_i$ 는 결합 인장 변위,  $\Delta \theta_i$ 는 굽힘 각변위  $\Delta \phi_i$ 는 비틀림 각 변위를 의미한다. 위의 식 (2)-(4)를 기존의 보 요소(beam element) 구조역학에 결합시키면 다음과 같은 관계식을 얻을 수 있다.

$$U_A = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2 \quad (5)$$

$$U_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{EI}{L(\Delta \theta)^2} = \frac{1}{2} \frac{EI}{(\Delta \theta)^2} \quad (6)$$

$$U_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GI} dL = \frac{1}{2} \frac{TL^2}{GJ} = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta \phi)^2 \quad (7)$$

여기서,  $U_A$ 은 보 요소의 인장 에너지,  $U_M$ 는 보 요소의 굽힘 에너지,  $U_T$ 는 보 요소의 비틀림 에너지를 나타내며,  $L$ 은 보 길이,  $A$ 는 보 요소의 단면적을 의미하고,  $N$ ,  $M$ ,  $L$ 은 축방향 힘(axial force), 굽힘 모멘트(bending moment), 비틀림(torsion)을 의미한다.  $E$ ,  $I$ ,  $J$ 는 보의 탄성계수, 관성 모멘트, 극관성 모멘트를 의미한다. 또한,  $\Delta L$ 은 보 축방향 변위,  $\Delta \theta$ 는 굽힘 각변위,  $\Delta \phi$ 는 비틀림 각 변위를 의미한다.

위의 식 (2)-(4)와 식 (5)-(7)을 서로 비교하면 다음과 같은 관계를 얻을 수 있다.

$$\frac{EA}{L} = k_r, \quad \frac{EI}{L} = k_\theta, \quad \frac{GJ}{L} = k_\tau \quad (8)$$

보 요소에 대한 탄성계수를 계산하기 위해서 구조역학의 단면적과 단면계수들이 정의되어야 하는데 이와 관련된 형상 인자들은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$A = \frac{\pi d^2}{4} \quad (9)$$

여기서,  $A$ 는 보 요소의 단면적,  $d$ 는 원형 보 요소의 직경을 의미한다.

$$I_{xx} = I_{yy} = I_{zz} = \frac{\pi d^4}{32} \quad (10)$$

여기서,  $I$ 는 관성 모멘트(moment of inertia)를 의미한다.

### 2.2 반데르발스 모델링

다층 형태 및 그래파이트 형태로 존재하는 그래핀은 단층 형태의 그래핀을 여러 층으로 쌓아 올림으로써 구조를 만들 수 있도록 존재하기도 한다. 이 때 층 간 작용하는 탄소 원자간 작용하는 에너지는 결합 에너지(bond energy)가 아닌 비결합 에너지(non-bonded energy) 즉, 반데르발스 에너지에 의해 상호 작용을 한다. 따라서 층간 상호 작용 에너지를 정의하기 위해서는 반데르발스 에너지(van der Waals interaction energy)에 대한 모델링이 필요하다. 비 결합 상호작용은 Lennard-Jones 6-12 포텐셜 함수를 사용하여 모델링할 수 있다. 본 논문에서 사용한 Lennard-Jones 포텐셜 함수는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$k(r) = 24 \frac{\epsilon}{\sigma^2} \left[ 26 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{14} - 7 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^8 \right] \quad (11)$$

여기서,  $r=1.142$  nm는 탄소 원자간의 거리이며,  $\epsilon=0.0018$  eV 그리고  $\sigma=0.33264$  nm로 Lennard-Jones 파라메타이다. 본 논문에서는 그래핀 시트의 층간 상호작용을 모사하는 요소로써 스프링 요소를 사용하였다.

### 2.3 유한요소 모델링

3차원 보 요소는 탄소 원자간 작용하는 상호작용 에너지를 모사하기 위해 사용하였다. Fig. 1은 보 요소의 각 노드에서의 힘, 굽힘 모멘트, 비틀림에 대해서 나타내고 있다. 여기서 노드는 탄소 원자에 대응한다. 각 노드에는 3개의 힘과 3개의 모멘트가 존재한다. 즉,  $f_{ix}, f_{iy}, f_{iz}, M_{ix}, M_{iy}, M_{iz}$ 와  $f_{jx}, f_{jy}, f_{jz}, M_{jx}, M_{jy}, M_{jz}$ 가  $i, j$  노드에 존재하게 된다. 보의 굽힘(bending)을 지배하는 미분방정식은 다음의 식으로 표현할 수 있다.

$$f(x) = EI \frac{d^4 w}{dx^4}, 0 \leq x \leq L \quad (12)$$

여기서,  $E$ 는 탄성계수(Young's modulus),  $I$ 는 관성모멘트(moment of inertia),  $w(x)$ 는 횡하중(transverse loading)과 처짐(deflection)을 의미한다.

보의 인장(stretching)에 대한 유한요소 미분방정식은 다음의 식으로 표현할 수 있다.

$$q(x) = EA \frac{d^2 u(x)}{dx^2} \quad (13)$$

여기서,  $A$ 는 보 요소의 단면적,  $q(x)$ 는 축방향 하중,  $u(x)$ 는 축방향 변위를 의미한다. 이에 대한 유한요소 수식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{Bmatrix} f_i \\ f_j \end{Bmatrix} = \frac{EA}{L} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i \\ u_j \end{Bmatrix} \quad (14)$$

여기서,  $u$ 는 축방향 변위,  $f$ 는 축방향 힘을 의미한다.

$$T(x) = GL \frac{d^2 \theta}{dx^2} \quad (15)$$

여기서,  $G$ 는 전단계수,  $J$ 는 극 관성 모멘트,  $T(x)$ 는 비틀림 하중,  $\theta$ 는 비틀림 변형을 의미한다. 이에 대한 유한요소 수식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{Bmatrix} T_i \\ T_j \end{Bmatrix} = \frac{GJ}{L} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \theta_i \\ \theta_j \end{Bmatrix} \quad (16)$$

여기서,  $u$ 는 축방향 변위,  $T$ 는 축방향 힘을 의미한다. 전체 시스템에 대한 지배 에너지 방정식은 식 (12), 식 (13)과 식 (15)를 조합하여 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\begin{aligned} U_{total} &= f(x) + q(x) + T(x) \\ &= EI \frac{d^4 w(x)}{dx^4} + EA \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + GL \frac{d^2 \theta}{dx^2} \end{aligned} \quad (17)$$

요소에 대한 평형 방정식은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\{f^e\} = [K^e] \{u^e\} \quad (18)$$

여기서  $\{f^e\}$ 는 요소의 질점 힘 벡터(nodal force vector)를  $\{u^e\}$ 는

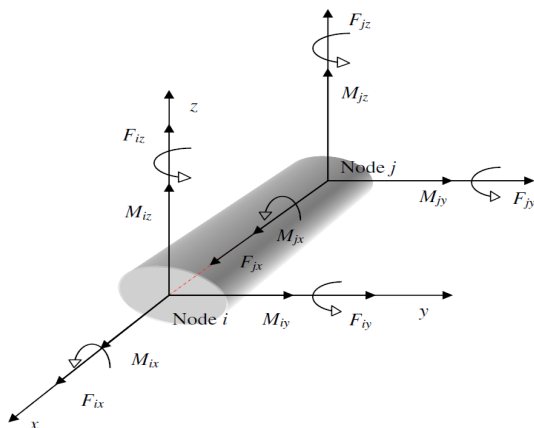


Fig. 1 Nodal forces, moment and torsion of beam element

요소의 질점 변위 벡터(nodal displacement vector)를 의미한다. 따라서 요소에 대한 강성행렬(stiffness matrix)은 식 (19)와 같이 나타낼 수 있다.

$$[K^e] = \begin{bmatrix} \frac{EA}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{EA}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{12EI_z}{L^3} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & -\frac{12EI_z}{L^3} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{12EI_y}{L^3} & 0 & \frac{6EI_z}{L^2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{12EI_y}{L^3} & 0 & \frac{6EI_z}{L^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{GI}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{GI}{L} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 & \frac{4EI_z}{L} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 & \frac{2EI_z}{L} & 0 \\ 0 & \frac{6EI_z}{L^2} & 0 & 0 & 0 & \frac{4EI_y}{L} & -\frac{2EI_z}{L^2} & 0 & 0 & 0 & \frac{2EI_y}{L^2} & 0 \\ \frac{EA}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{EA}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{12EI_z}{L^3} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & -\frac{12EI_z}{L^3} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{12EI_y}{L^3} & 0 & \frac{6EI_z}{L^2} & 0 & 0 & 0 & \frac{12EI_y}{L^3} & 0 & \frac{6EI_z}{L^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{GI}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{GI}{L} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 & \frac{2EI_z}{L} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 & \frac{4EI_z}{L} & 0 \\ 0 & \frac{6EI_z}{L^2} & 0 & 0 & 0 & \frac{2EI_y}{L} & -\frac{6EI_z}{L^2} & 0 & 0 & 0 & \frac{4EI_z}{L} & 0 \end{bmatrix} \quad (19)$$

### 3. 수치해석

#### 3.1 그래핀의 두께에 따른 굽힘 강성계수 예측

이 논문에서는 제시한 분자역학과 연속체 역학을 조합하여 새로운 유한요소 모델링 기법을 통해 그래핀에 대한 수치해석을 수행하였다. 수치해석 도구로 ABAQUS 상용 프로그램을 사용하였다. Fig. 2에서 보이는 바와 같이 X-Z 평면상에 존재하는 탄소원자간 기계적 거동을 계산하기 위하여 6 자유도를 가진 보 요소를 사용하였으며 다층 구조의 그래핀의 층간 작용하는 에너지와 거동을 표현하기 위해서 스프링 요소를 사용하여 그래핀 시트(graphene sheet)들의 관계를 나타내는 요소로 정의 하였다.

여기서 제시한 모델은 인장 탄성계수를 구하기 위한 기존의 모델을 사용하였으며 보 요소와 스프링 요소를 복합적으로 적용함으로써 탄소 원자가 결합력이 강한 그래핀 결합(bonded) 특성과 상대적으로 결합력이 약한 그래핀 면 사이의 비결합(non bonded) 특성을 표현하였다<sup>[10]</sup>. 이를 통해 보 요소와 스프링 요소를 결합한 새로운 형태의 모델을 통해 그래핀 적층 구조에 대한 기계적 특성 중 하나인 굽힘 탄성계수(elastic bending modulus)를 제안하였으며 해석 결과를 기존의 문헌과 실험값과 비교하여 모델의 신뢰성을 확보 하였다. 본 논문에 사용된 모델과 계산 결과를 검증하기 위하여 우선적으로 수정된 모스 포텐셜(modified Morse potential)을 사용하여 단층 그래핀(SLGS)에 대한 수치해석을 수행하여 결과 값을 기존의 논문 및 실험값과 비교하여 모델의 신뢰성과 타당성을 확보할 수 있었다. 굽힘 강성 계수를 예측하기 위해 Fig. 2~Fig. 4에 나타낸 것 과 같이 외팔보(cantilever beam)를 사용하여 x축을

고정하고 z방향으로 굽힘을 가하였다.

단면적은  $A_0 = wt$ 에 의해 계산되며 여기서  $w$ 는 그래핀 시트의 폭을,  $t$  ( $=0.34$  nm)는 그래핀 시트의 두께를 의미한다. 또한  $t$ 는 원래 그래핀 시트 모델의 길이를,  $\Delta L_0$ 는 z 방향의 처짐(deflection)을 나타낸다.

사각형 그래핀의 FE 모델 크기는 길이는 4.4051 nm이며 폭은

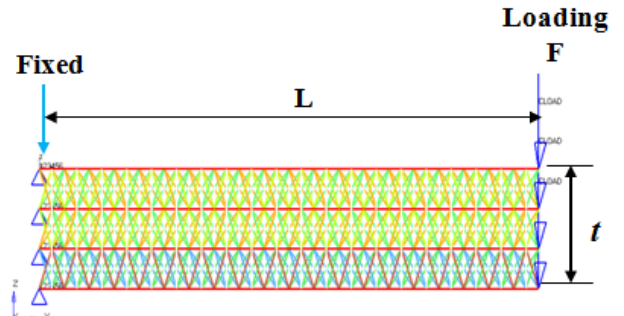


Fig. 2 Multi-layered graphene sheets finite element model for bending modulus

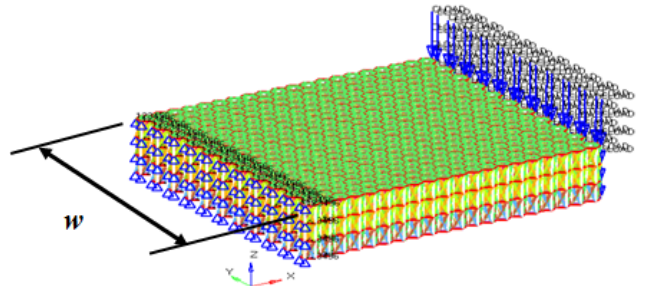


Fig. 3 Multi-layered graphene sheets isometric finite element model for bending modulus

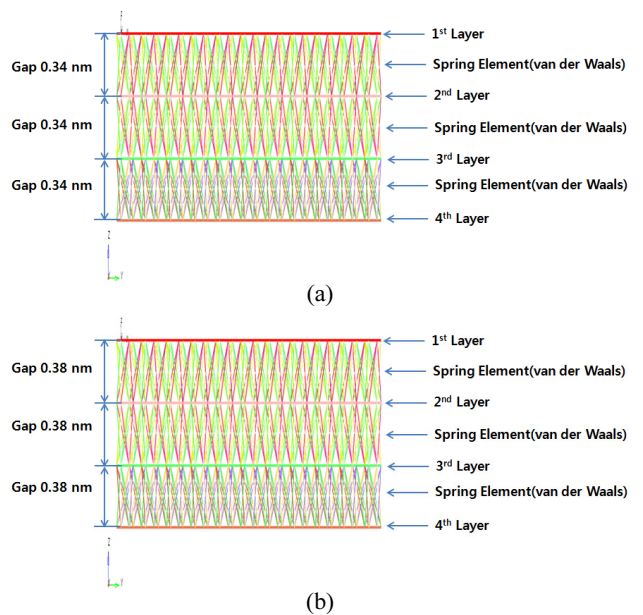


Fig. 4 Graphene sheet FE Model with different gap thickness (a) gap 0.34 nm (b) gap 0.38 nm

4.9225 nm 이다. FE 모델의 구성 요소는 탄소 원자간 결합력을 나타내기 위하여 총 1,311개의 보 요소가 사용되었고, 시트 간 반데르 발스 상호작용을 통한 비결합력을 나타내기 위하여 총 2459 개의 스프링 요소가 사용되었으며, 탄소 원자와 그의 위치를 좌표를 나타내는 총 903개의 노드가 사용되었다. 각 그래핀 시트의 두께는 0.3395 nm를 사용하였다<sup>[10]</sup>.

FE 모델을 위하여 사용된 보 요소와 스프링 요소의 물성치 및 형상값에 대해서는 Table 1에 보이는 값을 사용하였으며 이 값들은 식 (20)-(22)를 통해 구할 수 있다. 식 (20)를 사용하여 압축어 방향 및 지그재그 방향에 대한 굽힘 강성 계수를 식 (21)를 사용하여 인장 탄성계수를 계산할 수 있다.

$$E_t = \frac{\sigma}{\epsilon} = \frac{F/A_0}{\Delta L/L_0} = \frac{nF/wt}{\Delta L/L_0} \quad (20)$$

여기서,  $E_t$ 는 인장 스트레스에 의한 탄성계수,  $F$ 는 인장 하중,  $L$ 은 그래핀 시트의 길이,  $w$ 는 그래핀 시트의 폭,  $t$ 는 그래핀 시트의 두께,  $\Delta L$ 는 그래핀 시트의 변위를 의미한다.

$$E_b = \frac{nFL^3}{3\Delta L_b I_b} \quad (21)$$

여기서,  $E_b$ 는 굽힘에 의한 탄성계수,  $F$ 는 굽힘응력,  $L$ 은 그래핀 시트의 길이,  $\Delta L_b$ 는 굽힘에 의한 그래핀 시트의 처짐,  $I_b$ 는 단면형상 계수를 의미한다. 단면형상계수는 식 (22)와 같이 계산할 수 있다.

$$I_b = \frac{wt^3}{12} \quad (22)$$

여기서,  $I_b$ 는 단면형상계수,  $w$ 는 그래핀 시트의 폭,  $t$ 는 그래핀 시트의 두께를 의미한다 (Fig. 2, Fig. 3).

$$E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_\theta} \quad (23)$$

여기서,  $E$ 는 탄성계수  $L$ 은 요소의 길이를 의미한다.  $k_r$  (=652

nN/mm)는 결합 신축 상수,  $k_\theta$  (=0.278 nN/mm)는 굽힘 저항력 상수를 의미한다.

$$d = 4\sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}} \quad (24)$$

여기서,  $d$ 는 원형 보 요소의 직경을 의미한다.

그래핀의 원자단위의 전단계수  $G$ 는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$G = \frac{k_r^2 k_r L}{8\pi k_\theta^2} \quad (25)$$

여기서,  $L$ 은 요소의 길이,  $k_r$  (=0.876 nNm/rad<sup>2</sup>)는 비틀림 저항력 상수를 의미한다.

## 4. 결과 및 고찰

### 4.1 그래핀의 두께에 따른 굽힘 강성계수 예측

본 논문에서 제시한 FE 수치해석 결과의 타당성과 신뢰성을 확보하기 위해서 먼저 단층 그래핀 시트(SLGS)에 대해 압축어와 지그재그 방향에서 탄성계수 값을 계산하여 기존의 연구 결과와 비교하였다. 본 논문에서 계산된 단층 그래핀 시트의 탄성계수는 압축어 방향에서 1.18 TPa, 지그재그 방향에서 1.22 TPa의 값을 얻었다. 이는 기존의 1.13 TPa<sup>[17]</sup>와 1.80~1.83 TPa<sup>[7]</sup>의 결과와 매우 유사한 결과를 보임을 알 수 있었다. 따라서 본 논문에서 사용된 보 요소와 스프링 요소를 복합적으로 적용한 모델이 단층 그래핀 시트에서도 유효하게 적용됨을 확인할 수 있었으며 이를 바탕으로 복층 및 다층 그래핀 시트에 대해서도 유효하게 적용될 수 있음을 확인할 수 있었다.

Fig. 5는 그래핀의 시트 수가 한 겹에서 네 겹으로 증가되면서 갭 간격이 0.34 nm 일 때 압축어 및 지그재그 방향에서의 굽힘 탄성계수 계산한 값을 그래프로 나타내었다. 압축어 방향에서 1.18 TPa, 1.16 TPa, 1.4 TPa, 1.11 TPa 및 평균 1.13 TPa를, 지그재그 방향일 때 각각 1.22 TPa, 1.19 TPa, 1.17 TPa, 1.14 TPa 및 평균 1.1725 TPa를 굽힘 탄성계수(elastic bending modulus)를 얻을 수 있었다.

Fig. 6은 그래핀의 시트 수가 한 겹에서 네 겹으로 증가되면서 갭 간격이 0.38 nm 일 때 압축어 및 지그재그 방향에서의 굽힘 탄성계수 계산한 값을 그래프로 나타내었다. 압축어 방향에서 1.18 TPa, 1.13 TPa, 1.11 TPa, 1.05 TPa 및 평균 1.1175 TPa를, 지그재그 방향일 때 각각 1.18 TPa, 1.13 TPa, 1.11 TPa, 1.05 TPa 및 평균 1.1175 TPa를 굽힘 탄성계수(elastic bending modulus)를 얻을 수 있었다. 지그재그 방향에서 갭 간격 0.34 nm

Table 1 Material properties of graphene sheet for FEM

Parameter	Quantity	Formulation
Young's modulus (E, TP)	5.48	Eq. (20)
Bond and beam length (nm)	0.142	-
Diameter (nm)	0.146	Eq. (24)
Interlayer spacing (nm)	0.3395	-
Moment of Inertia (nm <sup>4</sup> )	2.2E-05	Eq. (10)
Cross section area (nm <sup>2</sup> )	0.0167	Eq. (9)
Shear modulus (TPa)	0.871	Eq. (25)

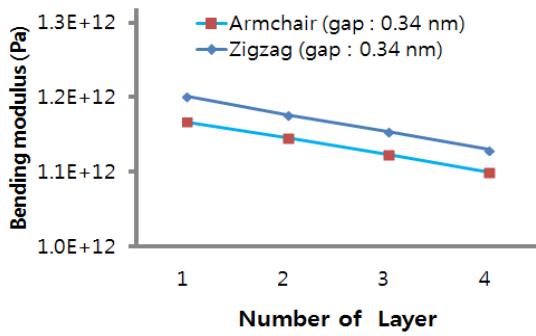


Fig. 5 Bending modulus of Armchair and Zigzag graphene sheet with 0.34 nm gap thickness of Graphene

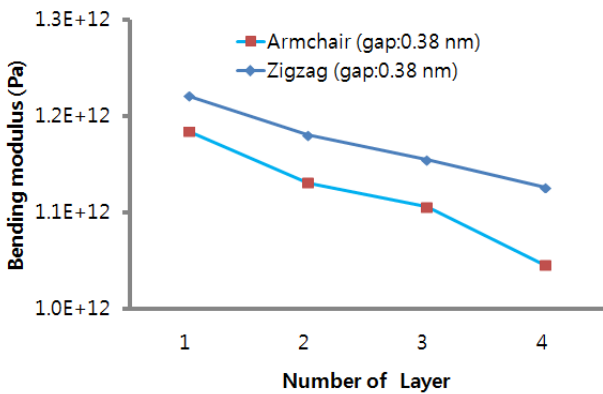


Fig. 6 Bending modulus of Armchair and Zigzag graphene sheet with 0.38 nm gap thickness of Graphene

일 때 각각 1.22 TPa, 1.19 TPa, 1.17 TPa, 1.14 TPa 및 평균 1.18 TPa의 굽힘 탄성계수, 갭 간격 0.38 nm 일 때 각각 1.22 TPa, 1.18 TPa, 1.16 TPa, 1.13 TPa 및 평균 1.1725 TPa 굽힘 탄성계수를 얻을 수 있었다.

Table 2에서는 갭 간격이 0.34 nm일 때와 0.38 nm 일 때 그래핀 시트의 수가 한 겹에서 네 겹까지 증가함에 따라 암체어 방향과 지그재그 방향에서의 본 논문에서 계산한 수치해석 결과 값들을 정리하였으며 이 결과들을 기존 문헌들에서 얻은 값들과 비교하였다. Table 2에서 기존의 MD 시뮬레이션을 통해 얻은 탄성계수 값 1.034 TPa<sup>[15]</sup>과 1.01 TPa<sup>[16]</sup>을 수치해석을 통해 얻은 본 논문의 결과들과 비교하면 비교적 잘 일치함을 알 수 있었다. 아울러 기존의 실험적 방법을 통해 얻은 탄성계수 값 1.0 TPa<sup>[9]</sup>과도 잘 맞는 것을 알 수 있다<sup>[7]</sup>. 탄성굽힘강성계수를 정확하게 예측할 수 있었으며 지그재그 방향에서의 탄성계수 값이 암체어 방향에서의 굽힘 탄성계수 값이 갭 간격 0.34 nm 일 때 약 2~3% 크고 갭 간격 0.38 nm 일 때 약 3~8% 크다는 사실을 알 수 있었다. Fig. 5과 Fig. 6을 통해 한 겹에서 네 겹의 그래핀 시트의 암체어 방향과 지그재그 방향에서의 굽힘에 의한 탄성계수 값이 서로 다르게 나타나고 있음을 알 수 있다. 그래핀이 서로 직각 방향에서 서로 다른

Table 2 Comparison study on the Bending modulus

Investigators	Elastic Bending Modulus (TPa), $E_b$	
	Armchair	Zigzag
	Gap (nm)	Gap (nm)
	0.34 / 0.38	0.34 / 0.38
Present Work (SLGS)	1.18 / 1.18	1.22 / 1.22
Present Work (DLGS)	1.16 / 1.13	1.19 / 1.18
Present Work (TLGS)	1.14 / 1.11	1.17 / 1.16
Present Work (QLGS)	1.11 / 1.05	1.14 / 1.13
Average	1.13 / 1.1175	1.18 / 1.1725
Lier <sup>[11]</sup> , Reddy et al. <sup>[12]</sup>	1.1122	1.1097
Xiao et al. <sup>[13]</sup> - MM	1.13	
Scarpa et al. <sup>[7]</sup> - MM	1.80 ~ 1.83	
Lee et al. <sup>[9]</sup> - Experimental	1.0	
Weidong W. et al. <sup>[14]</sup> - MD	1.034	

기계적 거동을 보이므로 그래핀의 거동은 이방성(anisotropic)임을 확인할 수 있었다.

암체어와 지그재그 방향을 따라 이론적으로 탄성계수는 그래핀 시트 레이어(layer)의 두께에 따라 변한다<sup>[15]</sup>. 그래핀 시트의 두께가 증가함에 따라 탄성계수의 값은 반비례하여 감소한다는 이론적인 결과를 바탕으로 본 연구에서 얻은 결과와 같은 경향을 보인다는 것을 확인하였다. 그래핀 시트가 일정 간격을 유지하면서 서로 밀착된 상태에 있을 경우 이는 그래핀 시트 층간에 작용하는 비결합력인 반데르발스 결합력이 약화된다는 것으로 이해 할 수 있다. 그러므로 본 논문에서 제시된 FE 시뮬레이션 모델의 수치해석식 (26)에 의해 검증될 수 있음을 알 수 있다. 식 (26)은 탄성계수와 그래핀 시트 레이어 두께에 대한 관계를 나타내고 있다<sup>[15]</sup>.

$$E_a = E_z = \frac{4\sqrt{3}}{t} \frac{k_r k_\theta}{0.25k_r L^2 + 9k_\theta} \quad (26)$$

여기서,  $E_a$ 는 암체어 방향에서의 탄성계수,  $E_z$ 는 지그재그 방향에서의 탄성계수,  $t$ 는 그래핀 시트의 두께,  $L$ 은 그래핀 시트의 길이를 의미한다.

또한, 기존의 복층일 경우 분자동역학(MD) 기법을 사용한 연구 결과에 의하면 그래핀 시트간의 반데르발스 비결합력에 따른 탄성계수의 상관관계에 대해서 단층일 경우일 때보다 복층구조로 층간 비결합력이 반데르발스 비결합력에 의해 연결되어 있을 때 탄성계수의 값이 감소한다는 연구 결과를 제시 하였다<sup>[18]</sup>. 이 결과에 의하면 층간 반데르발스 영향에 의해서 탄성계수는 약 11.47% 감소하는 경향을 나타내고 있음을 알 수 있다. 이는 그래핀의 층수가 두 겹, 세 겹, 네 겹으로 증가할수록 반데르발스의 영향에 의해 탄성계수가 감소한다는 결과를 의미한다. 이를 통해 본 논문의 연구 결과

의 신뢰성을 검증할 수 있었다. 이는 FEM을 사용한 본 논문의 결과와 같은 경향을 보임을 알 수 있었다. 이를 통해 본 논문의 연구 결과의 신뢰성을 검증할 수 있었다.

## 5. 결론

본 논문을 통한 수치해석 수행 결과 두께 및 갭의 영향에 따른 압축어 및 지그재그 방향에서의 굽힘 탄성계수(bending elastic modulus)를 예측할 수 있었으며 기존의 이론적인 계산이나 여러 실험을 통해 얻은 결과와 매우 유사한 결과를 얻음으로써 본 논문에서 새롭게 제시한 모델의 신뢰성과 타당성이 있음을 확인할 수 있었다. 두께가 증가함에 따라 굽힘 탄성계수 값이 감소하는 결과를 확인하였다. 이는 굽힘 탄성계수가 두께에 반비례 관계에 있는 함수라는 기존의 이론적 논문 결과와 일치된 경향을 보이고 있음을 확인하였다<sup>[3]</sup>. 또한 두께가 증가함으로 인해 그래핀의 탄소 원자간 작용하는 강한 비결합력을 가진 반데르발스 상호작용이 약화되는 물리적 의미를 가진다는 사실을 확인할 수 있었다. 그리고 압축어 방향 및 지그재그 방향에서의 기계적 물성치가 다른 값을 보임으로써 그래핀 재료의 이방성 성질이 확인되었다. 이와 같은 결과는 인장으로 인한 탄성계수 값들이 보이는 경향과 매우 유사한 결과를 나타냄을 알 수 있었다.

본 논문에서 제시된 FEM을 활용한 수치해석 모델이 그래핀 시트의 두께 및 그래핀 시트 간 갭 두께의 변화에 따른 압축어 및 지그재그 방향성에 따른 그래핀의 대표적인 기계적 특성인 굽힘 탄성 계수에 대해 매우 효율적으로 예측할 수 있다는 사실을 확인하였다. 본 논문의 연구 결과는 우수한 굽힘 특성을 활용한 그래핀 멀티터치 스크린이나 접이식 모바일 기기 등의 다양한 응용분야에 기초 자료로 적용이 가능하다고 판단된다. 뿐만 아니라 그래핀을 활용한 복합재의 기계적 특성을 이해하거나 개선하기 위한 가이드로 활용할 수 있을 것으로 판단된다.

## References

- [1] Geim, A. K., Novoselov, K. S., 2007, The Rise of Graphene, *Nature Mater*, 6:3 183-191.
- [2] Ranjbarboreh, A. R., Wang, B., Shen, X., Wang, G., 2011, Advanced Mechanical Properties of Graphene Paper, *Journal of Applied Physics*, 109:1 014306-014311.
- [3] Golkarian, A. R., Jabbarzadeh, M., 2013, The Density Effect of van der Waals Forces on the Elastic Modules in Graphite Layers, *Computational Materials Science*, 74 138-142.
- [4] Sakhaee-Pour, A., 2009, Elastic Properties of Single-layered Graphene Sheet, *Solid State Communication*, 149:1/2 91-95.
- [5] WenXing, B., ChangChun, Z., WanZhao, C., 2004, Simulation of Young's Modulus of Single-walled Carbon Nanotubes by Molecular Dynamics, *Physica B*, 352:1/4 156-163.
- [6] Blakslee, O. L., Proctor, D. G., 1970, Elastic Constants of Compression Annealed Pyrolytic Graphite, *J. Appl. Phys.*, 41:8 3373-3382.
- [7] Scarpa, F., Adhikari, S., Gil, A. J., Remillat, C., 2009, The Bending of Single Layer Graphene Sheets: the Lattice versus Continuum Approach, *Nanotechnology*, 21:12 1-9.
- [8] Hod, O., Scuseria, G. E., 2009, Electromechanical Properties of Suspended Graphene Nanoribbons, *Nano Letters*, 9:7 2619-2622.
- [9] Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W., Hone, J., 2008, Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene, *Science*, 321:5887 385-388.
- [10] Kim, D. Y., Han, S. Y., 2015, Effect of Interlayer Forces for Multilayered Graphene Sheets with Different Gap Thicknesses in using Nanoscale Molecular Mechanics Approach, *Journal of Mechanical Science and Technology*, 29:5 1-10.
- [11] Van Lier, G., Van Alsenoy, C., Van Doren, V., Geerlings, P., 2000, Ab initio Study of the Elastic Properties of Single-walled Carbon Nanotubes and Graphene, *Chem. Phys Letter*, 326:1/2 181-185.
- [12] Reddy, C. D., Rajendran, S., Liew, K. M., 2005, Equivalent Continuum Modeling of Graphene Sheets, *Int J. Nanosci*, 4:4 631-636.
- [13] Lu, X., Hu, Z., 2012, Mechanical Property Evaluation of Single-walled Carbon Nanotubes by Finite Element Modeling, *Composites Engineering*, 43:4 1902-1913.
- [14] Wang, W., Shen, C., Li, S., 2014, Mechanical Properties of Single Layer Graphene Nanoribbons through Bending Experimental Simulations, *AIP Advances*, 4 1-8.
- [15] Shokrieh, M. M., Rafiee, R., 2010, Prediction of Young's Modulus of Graphene Sheets and Carbon Nanotubes using Nanoscale Continuum Mechanics Approach, *Material and Design*, 31:2 790-795.
- [16] Zhao, H., Min, K., Aluru, N. R., 2009, Size and Chirality Dependent Elastic Properties of Graphene Nanoribbons under Uniaxial Tension, *Nano Letters*, 9:8 3012-3015.
- [17] Frank, I. W., Tanenbaum, D. M., van der Zande, A. M., McEuen, P. L., 2007, Mechanical Properties of Suspended Graphene Sheets, *Journal of Vacuum Science & Technology B*, 25:6 2558-2561.
- [18] Zhang, Y. Y., Wang, C. M., Cheng, Y., Xiang, Y., 2011, Mechanical Properties of Bilayer Graphene Sheets Coupled by sp<sup>3</sup> Bonding, *Carbon*, 49:13 4511-4517.