

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

выпуск 12

ТВЕРЬ 2020

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в журнале «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2020. – Вып. 12. – 908 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Журнал предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2020

© Тверской государственный университет, 2020

К ВОПРОСУ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ

Д.В. Пьянзин, Н.А. Панькин, А.Н. Чалдышкин, Н.И. Чистяков
ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный
университет им. Н.П.Огарева»
430005, Россия, Саранск, ул. Большевикская, 68
panjkinna@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.284

Аннотация: Проведено экспериментальное исследование и компьютерное моделирование в программном комплексе ANSYS термического воздействия на металлический материал. Обнаружено уменьшение значений коэффициента теплового расширения при увеличении скорости нагрева образца. Показано, что данное поведение обусловлено наличием градиента температур между его центральной и поверхностью частями. Выявлено хорошее согласие результатов компьютерного моделирования с соответствующими экспериментальными данными. Значения коэффициента теплового расширения близки к истинным, которые были определены при малых скоростях нагрева/охлаждения или при длительной выдержке образца при конечной и начальной температурах. Результаты моделирования в ANSYS могут быть использованы при интерпретации и прогнозировании тепловых свойств металлических материалов.

Ключевые слова: коэффициент теплового расширения, моделирование, скорость нагрева, градиент температуры, эксперимент.

1. Введение

Наноматериалы и системы на их основе находят широкое применение в различных современных областях промышленности. Их используют при разработке материалов и изготовлении изделий с уникальными эксплуатационными свойствами. Одним из них является коэффициент теплового линейного расширения (КТР). Для наночастиц его экспериментальное определение крайне затруднительно и значения КТР сильно зависят от их размера и распределения компонентов в них [1]. Данный факт обусловлен большим соотношением площадь поверхности/объем частицы. Учет значений КТР также необходим при нанесении покрытий на поверхности различных материалов, создании композиционных материалов и т.д. [2-6]. Особенно это касается тех случаев, когда создаваемый материал в ходе последующей эксплуатации или в процессе изготовления изделия будет подвергаться постоянному или циклическому воздействию высоких температур, а также их градиенту. Разные значения КТР компонентов изделия, обусловленные характеристиками материалов и температурной зависимостью коэффициента теплового расширения, приводят к возникновению термомеханических напряжений. В случае если значения последних превзойдут механические пределы (прочности, пластичности) может произойти разрушение изделия. Вследствие этого, контроль величины КТР

используемого материала является необходимой операцией перед его практическим применением.

В настоящее время для экспериментального определения коэффициента теплового расширения используются научно-исследовательское оборудование для термомеханического анализа и dilatометры [7]. Принцип их действия основан на регистрации изменения линейных размеров исследуемого образца вдоль некоторого направления при заданной температурной программе. При этом многообразие способов определения КТР определяется различием методов измерения удлинения исследуемого образца и способах его нагрева (температурной программы) [7-11]. Чаще всего применяется следующий подход – исследуемый образец нагревается с постоянной скоростью и фиксируются геометрические размеры образца. В этом случае значение коэффициента теплового расширения α определяется из выражения [8-11]:

$$\alpha = \frac{1}{l_0} \frac{\Delta l}{\Delta t},$$

где l_0 – первоначальная длина образца, Δl – изменение линейных размеров при изменении температуры на Δt .

Несмотря на многообразие способов определения КТР остаются вопросы: по методологии проведения соответствующего эксперимента; правильной интерпретации его результатов; по возможности уменьшения времени замеров без потери точности. Кроме того, в случае наноструктур и наноматериалов, экспериментальное определение значений КТР и/или их интерпретация крайне затруднительны. В этом случае применение компьютерного моделирования позволяет лучше понять физико-механические процессы происходящие в материале при термическом воздействии на него.

Целью настоящей работы являлось экспериментальное и модельное изучение влияния параметров измерения (скорости нагрева) коэффициента теплового расширения на его значения.

2. Методика эксперимента

Температурная программа для определения значения коэффициента линейного теплового расширения, в рамках данного исследования, включала в себя три основных этапа: 1) выдержка при температуре 25 °С в течение 60 минут (происходит нагрев/охлаждение от комнатной температуры); 2) нагрев с заданной скоростью (от 1 до 5 °С/мин) до температуры 100 °С; 3) выдержка при температуре 100 °С в течение 60 минут. При этом, используемые температуры вышеуказанных этапов могут быть любыми. Их значения, в общем случае, определяются исходя из требований заказчика или специфики научных исследований. Первый этап

температурной программы необходимо для вывода температуры на рабочую (при которой необходимо определить значение КТР). Это обусловлено тем, что исследуемый образец изначально может находиться при различных температурах. Продолжительность первого и третьего этапов выбиралась таким образом, чтобы за это время стабилизировались линейные размеры образца (определено по результатам предварительных испытаний).

Измерение коэффициента теплового расширения проводили на установке термомеханического анализа TMA 840 фирмы Mettler Toledo. В качестве опытного/эталонного образца взят медный цилиндрический образец диаметром 4 мм и высотой 10 мм. Металлический однокомпонентный материал выбран из следующих соображений: для него имеются табличные данные по КТР; исключаются проявления эффектов связанных с химическими и термомеханическими взаимодействиями компонентов или они достаточно хорошо известны. Моделирование теплового нагрева проводили методом конечных элементов в программном комплексе ANSYS в модуле Mechanical [12]. При этом температурные зависимости теплофизических параметров (теплоемкости, коэффициентов линейного расширения и теплопроводности) не рассматривались. Данное обусловлено тем, что в используемом нами температурном интервале (20–100 °С) их изменениями можно пренебречь [2, 13].

3. Результаты и их обсуждение

На рис. 1 показаны распределения температуры по объему печи и образца в результате теплового воздействия на образец с учетом его теплового расширения. Результаты получены с помощью программного комплекса ANSYS Mechanical. Данные моделирования свидетельствуют о том, что выбранного времени (60 минут) достаточно для прогрева образца до требуемых температур по окончании первого и третьего этапов температурной программы. При этом в конце второго этапа исследуемый материал полностью не прогревается.

Результаты модельного исследования зависимости температуры в центре образца от времени термической обработки (см. рис. 2) показывают, что времени порядка 15–30 минут достаточно, чтобы при протекании первого и третьего этапов температурной программы происходил полный прогрев образца до требуемых температур в их конце –25 °С и 100 °С, соответственно. Данный факт справедлив для всех рассматриваемых скоростей нагрева образца. Экспериментальные данные показывают, что для стабилизации размеров образца необходимо порядка 40–50 минут (возрастает с увеличением скорости нагрева исследуемого образца).

На рис. 3. показана зависимость температуры в центре цилиндрического образца по окончании второго этапа температурной программы определенная из модельного эксперимента.

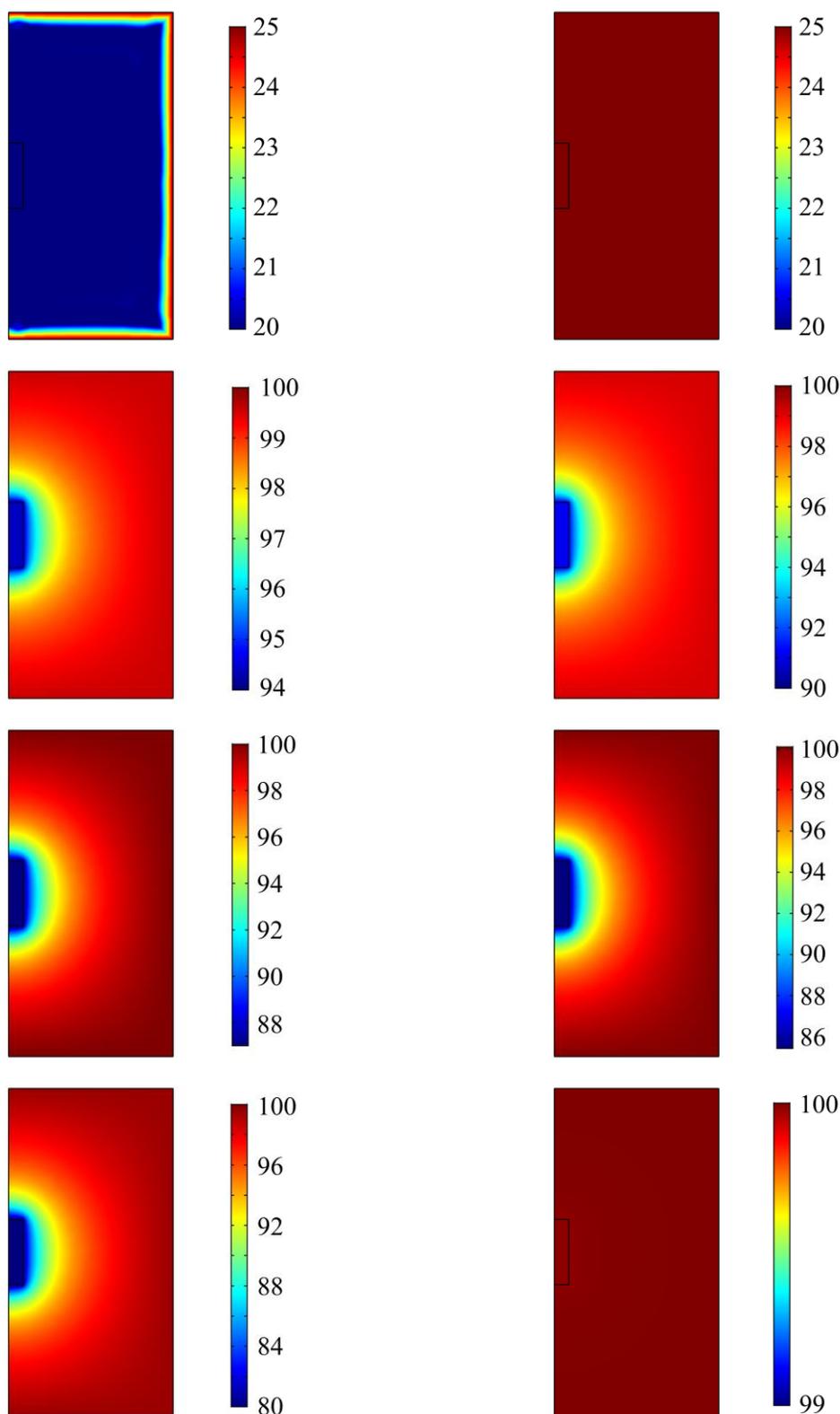


Рис. 1. Распределение температуры по объему печи и образца (1 – исходное, 2 – по окончании первого этапа, 3 – 1°C/мин, 4 – 2°C/мин, 5 – 3°C/мин, 6 – 4°C/мин, 7 – 5°C/мин, 8 – по окончании третьего этапа).

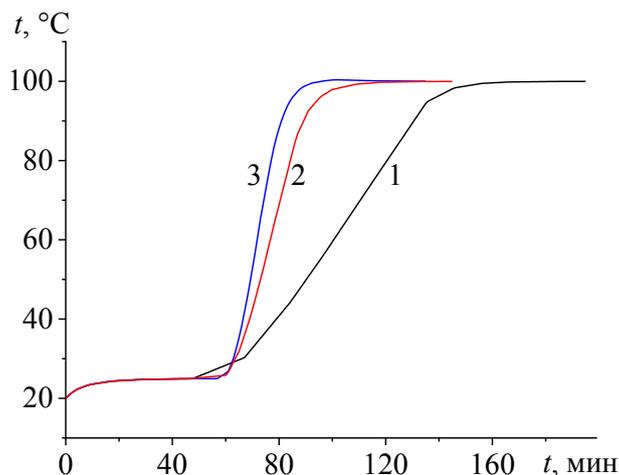


Рис. 2. Зависимость температуры в центре образца от времени выполнения температурной программы по данным программного комплекса ANSYS Mechanical (1 – 1°C/мин, 2 – 3°C/мин, 3 – 5°C/мин).

Можно отметить её практически линейное уменьшение с ростом скорости нагрева ν . К сожалению, экспериментальным методом данную температуру измерить крайне затруднительно. При этом наблюдается градиент температуры между поверхностью образца и его центром, который увеличивается с ростом ν . Данный факт приводит к тому, что конечные линейные размеры образца различаются для рассматриваемых скоростей нагрева. Как следствие – наблюдается отличие значений коэффициента теплового расширения измеренного при используемых ν .

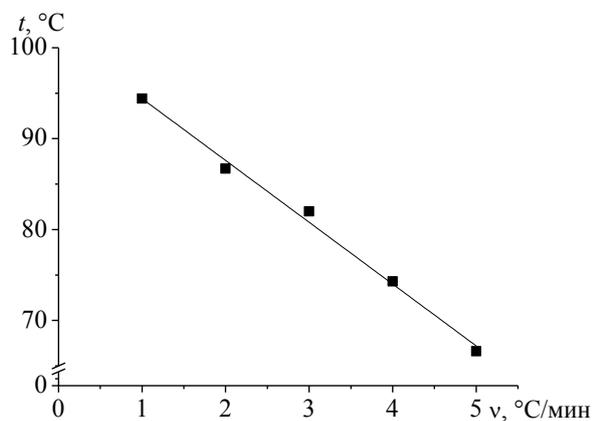


Рис. 3. Температура в центре цилиндрического образца после окончания второго этапа (результаты моделирования в программном комплексе ANSYS).

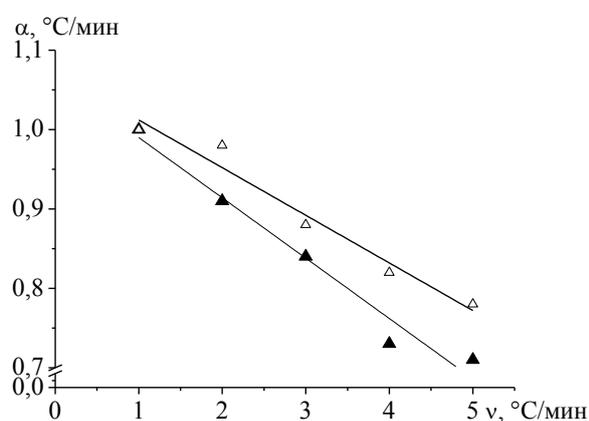


Рис. 4. Относительные значения КТР полученные при различных скоростях нагрева (результаты моделирования в программном комплексе (▲) и эксперимента (△)).

На рис. 4 показана зависимость экспериментального и вычисленного значений КТР α , определенных из второго участка температурной программы, от скорости нагрева ν . Можно отметить уменьшение значений

α с увеличением ν . Заметим, что значения вычисленные при скорости нагрева $1\text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$ близки к табличному значению ($16,7 \cdot 10^{-6}\text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ [12]) коэффициента теплового расширения меди (различия не более 1%).

Аналогичный результат получается при нахождении КТР из значений длины образца по окончании первого и третьего этапов. При этом в диапазоне скоростей нагрева $1\text{--}4\text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$ данные для КТР достаточно хорошо описываются линейной зависимостью.

Экспериментальные значения КТР несколько выше полученных в модели – $18,2 \cdot 10^{-6}\text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ – определены из обработки данных первого и третьего этапов термической обработки, а также при скорости нагрева $1\text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$. Данная разница с модельными данными может быть связана с тем, что при расчетах мы рассматривали чистую медь. При этом даже малое содержание примесей может сильно исказить результаты КТР. Кроме того, данный факт может быть связан с различиями в геометрии реальной нагревательной камеры и конструкции используемой при моделировании (в сопроводительных документах на соответствующее экспериментальное оборудование точные размеры не указываются). Аналогично модельным данным, отмечается уменьшение значений α с ростом скорости нагрева ν .

Кроме того, для $\nu = 2 \div 4\text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$, экспериментальные точки также описываются прямой. При этом угловой коэффициент близок к значению полученных при обработке модельных данных.

4. Заключение

На основании результатов эксперимента и компьютерного моделирования можно сделать следующие выводы.

1. Увеличение скорости нагрева сопровождается уменьшением величины КТР, связанное с неравномерностью прогрева объема нагревательной камеры и образца.

2. Для получения значений коэффициента теплового расширения близких к истинным необходимо использовать малые скорости нагрева/охлаждения или значения линейных размеров образца полученных при его длительной выдержке при конечной и начальной температурах.

3. Экспериментальные и данные компьютерного моделирования позволяют говорить о возможности применения расчетов в программном комплексе ANSYS для прогнозирования тепловых свойств металлических материалов.

Библиографический список:

1. **Сдобняков, Н.Ю.** О коэффициенте линейного расширения бинарных наночастиц на основе золота и меди / Н.Ю. Сдобняков, В.С. Мясниченко, П.М. Ершов, Ю.Н. Цепягина // VIII Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»,

- Тверь, 28 мая – 1 июня 2018: сборник научных трудов. – Тверь: Тверской государственный университет, 2018. – С. 339-440.
2. **Chung, D.D.L.** Carbon composites. Composites with carbon fibers, nanofibers and nanotubes / D.D.L. Chung. – Kidlington, Oxford, Cambridge: Butterworth-Heinemann, 2017. – 706 p. DOI: 10.1016/C2014-0-02567-1.
 3. **Бао, У.** Evaluating thermal expansion coefficient of *SiC* coatings by relative method / У. Бао, Д. Jiang, J. Gong // Key Engineering Materials. – 2017. – V. 726. – P. 110-114. DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.726.110.
 4. **Botean, A.-I.** Thermal expansion coefficient determination of polylactic acid using digital image correlation / A.- I. Botean // E3S Web of Conferences. EENVIRO 2017 Workshop - Advances in Heat and Transfer in Built Environment. – 2018. – V. 32. – Art. № 01007. – 63 p. DOI: 10.1051/e3sconf/20183201007.
 5. **Kablov, E.N.** *AlSiC*– based metal matrix composites for power electronic devices / E.N. Kablov, D.V. Grashchenkov, B.V. Shchetanov, et al. // Composites: Mechanics, Computations, Applications. – 2013. – V. 4. – № 1. – P. 65-74. DOI: 10.1615/CompMechComputApplIntJ.v4.i1.40.
 6. **Singh, H.** Development of *Cu* reinforced *SiC* particulate composites / H. Singh, L. Kumar, S.N. Alam // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 4th National Conference on Processing and Characterization of Materials 5–6 December 2014, Rourkela, India. – 2015. – V. 75. – Art. № 012007. – 13 p. DOI: 10.1088/1757-899X/75/1/012007.
 7. **Аматуни, А.Н.** Методы и приборы для определения температурных коэффициентов линейного расширения материалов / А.Н. Аматуни. – М.: Изд-во стандартов, 1972. – 140 с.
 8. Материалы углеродные. Метод определения температурного коэффициента линейного расширения: ГОСТ Р 54253-2010. – Введ. впервые 01.07.2012.
 9. Пластмассы. Термомеханический анализ (ТМА). Часть 2. Определение коэффициента линейного теплового расширения и температуры стеклования: ГОСТ 32618.2-2014. – Введ. впервые 01.03.2015.
 10. Арматура композитная полимерная для армирования бетонных конструкций. Методы определения характеристик долговечности: ГОСТ 32486-2013. – Введ. впервые 01.01.2015.
 11. Стекло и изделия из него. Метод определения температурного коэффициента линейного расширения: ГОСТ 10978-2014. – Взамен ГОСТ 10978-83; введ. 01.04.2016.
 12. Extreme thermal expansion modeling in ANSYS MECHANICAL (workbench). – Режим доступа: [www.url: https://www.simutechgroup.com/tips-and-tricks/fea-articles/139-extreme-thermal-expansion-modeling-in-ANSYS-mechanical](https://www.simutechgroup.com/tips-and-tricks/fea-articles/139-extreme-thermal-expansion-modeling-in-ANSYS-mechanical). – 15.10.2020.
 13. **Зиновьев, В.Е.** Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Справочник / В.Е. Зиновьев. – М.: Металлургия, 1989. – 384 с.

References:

1. **Sdobnyakov, N.Yu.** О коэффициенте линейного расширения бинарных наночастиц на основе золота и меди [On the coefficient of linear expansion of binary nanoparticles based on gold and copper] / N.Yu. Sdobnyakov, V.S. Myasnichenko, P.M. Ershov, Yu.N. Tseyragina // VIII Mezhdunarodnaya nauchnaya konferentsiya «Khimicheskaya termodinamika i kinetika», Tver, 28 May – 1 June 2018: sbornik nauchnykh trudov. – Tver': Tverskoi gosudarstvennyi universitet, 2018. – P. 339-440. (In Russian).
2. **Chung, D.D.L.** Carbon composites. Composites with carbon fibers, nanofibers and

- nanotubes / D.D.L. Chung. – Kidlington, Oxford, Cambridge: Butterworth-Heinemann, 2017. – 706 p. DOI: 10.1016/C2014-0-02567-1.
3. **Bao, Y.** Evaluating thermal expansion coefficient of *SiC* coatings by relative method / Y. Bao, D. Jiang, J. Gong // *Key Engineering Materials*. – 2017. – V. 726. – P. 110-114. DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.726.110.
4. **Botean, A.-I.** Thermal expansion coefficient determination of polylactic acid using digital image correlation / A.- I. Botean // *E3S Web of Conferences*. EENVIRO 2017 Workshop - Advances in Heat and Transfer in Built Environment. – 2018. – V. 32. – Art. № 01007. – 63 p. DOI: 10.1051/e3sconf/20183201007.
5. **Kablov, E.N.** *AlSiC* – based metal matrix composites for power electronic devices / E.N. Kablov, D.V. Grashchenkov, B.V. Shchetanov, et al. // *Composites: Mechanics, Computations, Applications*. – 2013. – V. 4. – № 1. – P. 65-74. DOI: 10.1615/CompMechComputApplIntJ.v4.i1.40.
6. **Singh, H.** Development of *Cu* reinforced *SiC* particulate composites / H. Singh, L. Kumar, S.N. Alam // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 4th National Conference on Processing and Characterization of Materials 5–6 December 2014, Rourkela, India. – 2015. – V. 75. – Art. № 012007. – 13 p. DOI: 10.1088/1757-899X/75/1/012007.
7. **Amatuni, A.N.** Metody i pribory dlya opredeleniya temperaturnykh koehffitsientov lineinogo rasshireniya materialov [Methods and devices for determining the temperature coefficients of linear expansion of materials] / A.N. Amatuni. – M.: Izd-vo standartov, 1972. – 140 p. (in Russian).
8. Materialy uglerodnye. Metod opredeleniya temperaturnogo koehffitsienta lineinogo rasshireniya [Carbon materials. Test method for linear thermal expansion coefficient]: GOST R 54253-2010. – Vved. v pervye 01.07.2012. (in Russian).
9. Plastmassy. Termomekhanicheskii analiz (TMA). Chast' 2. Opredelenie koehffitsienta lineinogo teplovogo rasshireniya i temperatury steklovaniya [Plastics. Thermomechanical analysis (TMA). Part 2. Determination of coefficient of linear thermal expansion and glass transition temperature]: GOST 32618.2-2014. – Vved. v pervye 01.03.2015. (in Russian).
10. Armatura kompozitnaya polimernaya dlya armirovaniya betonnykh konstruktsii. Metody opredeleniya kharakteristik dolgovechnosti [Polymer composite frame for reinforcement of concrete structures. Methods for determination of durability characteristics]: GOST 32486-2013. – Vved. v pervye 01.01.2015. (in Russian).
11. Steklo i izdeliya iz nego. Metod opredeleniya temperaturnogo koehffitsienta lineinogo rasshireniya [Glass and glass products. Test method for linear thermal expansion coefficient]: GOST 10978-2014. – Vzamen GOST 10978-83; vved. 01.04.2016. (in Russian).
12. Extreme thermal expansion modeling in ANSYS MECHANICAL (workbench). – Access mode: [www.url: https://www.simutechgroup.com/tips-and-tricks/fea-articles/139-extreme-thermal-expansion-modeling-in-ANSYS-mechanical](https://www.simutechgroup.com/tips-and-tricks/fea-articles/139-extreme-thermal-expansion-modeling-in-ANSYS-mechanical). – 15.10.2020.
13. **Zinov'ev, V.E.** Teplofizicheskie svoistva metallov pri vysokikh temperaturakh. Spravochnik [Thermophysical properties of metals at high temperatures. Handbook] / V.E. Zinov'ev. – M.: Metallurgiya, 1989. – 384 p. (in Russian).

Original paper

**TO THE PROBLEM OF DETERMINING THE COEFFICIENT OF THERMAL EXPANSION
OF MATERIALS**

D.V. Pyanzin, N.A. Pan'kin, A.N. Chaldyshkin, N.I. Chistyakov
Ogarev Mordovia State University, Saransk, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.284

Abstract: An experimental study and computer modeling in the ANSYS software package of

the thermal effect on a metal material was carried out. A decrease in the values of the coefficient of the thermal expansion is noted with an increase in the heating rate of the sample. It is shown that this behavior is due to the presence of the temperature gradient between its central and surface parts. Good agreement of the results of computer simulation with the corresponding experimental data is found. The values of the coefficient of thermal expansion are close to true ones determined at low heating / cooling rates or with long exposure of the sample at the final and initial temperatures. The simulation results in ANSYS can be used to interpret and predict thermal properties of metallic materials.

Keywords: coefficient of thermal expansion, modeling, heating rate, temperature gradient, experiment.

Пьянзин Денис Васильевич – к.т.н., доцент, доцент кафедры радиотехники ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва»

Панькин Николай Александрович – к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры физики твердого тела ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва»

Чалдышкин Александр Николаевич – преподаватель кафедры радиотехники ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва»

Чистяков Николай Иванович – ведущий инженер кафедры физики твердого тела ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва»

Denis V. Pyansin – Ph. D., Docent, Department of Radio Engineering, National Research N.P. Ogarev Mordovia State University

Nikolay A. Pan'kin – Ph. D., Docent, Department of Solid State Physics, National Research N.P. Ogarev Mordovia State University

Alexander N. Chaldyshkin – Lecturer, Department of Radio Engineering, National Research N.P. Ogarev Mordovia State University

Nikolay I. Chistyakov – Leading Engineer, Department of Solid State Physics, National Research N.P. Ogarev Mordovia State University

Поступила в редакцию/received: 25.08.2020; после рецензирования/revise: 21.09.2020; принята/accepted 02.10.2020.