



## Investigation of thermal expansion coefficient of copper using molecular dynamics simulation: Effect of size and number of crystals on single- and poly-crystalline structures

Sadri Şen\*

Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Atatürk University, 25240, Erzurum, Türkiye

### Highlights:

- Calculation of thermal expansion coefficients of single- and poly-crystalline copper nanostructure
- Comparison of thermal expansion coefficients of single- and multi-crystalline copper nanostructures
- Use of molecular dynamics simulation in the calculations

### Keywords:

- Copper single- and poly-crystalline nanostructures
- Ethyl acetate
- Thermal expansion coefficient
- Molecular dynamics simulations
- Embedded atom method

### Article Info:

Research Article  
Received: 29.04.2024  
Accepted: 08.11.2024

### DOI:

10.17341/gazimmfd.1475518

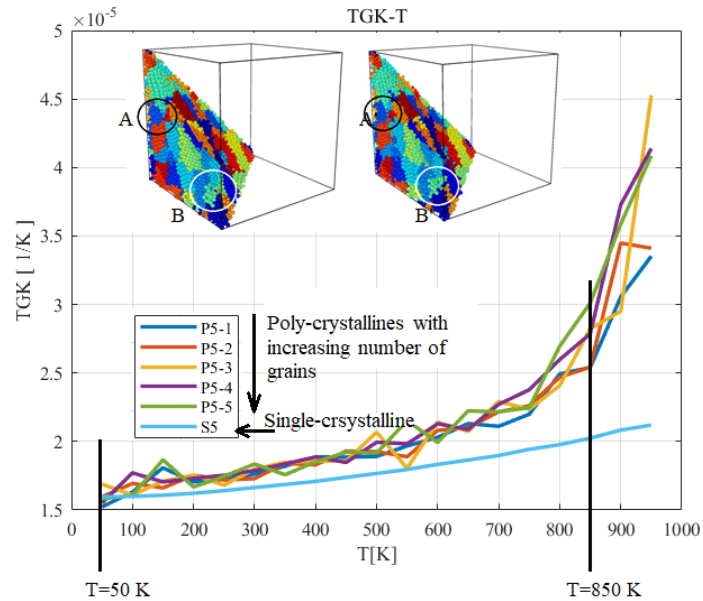
### Acknowledgement:

The numerical calculations reported in this paper were made completely/partially at TÜBİTAK ULAKBİM, High Performance and Grid Computing Center (TRUBA resources).

### Correspondence:

Author: Sadri Şen  
e-mail:  
sasen@atauni.edu.tr  
phone: +90 532 653 6192

### Graphical/Tabular Abstract



**Figure A.** Comparison of grain geometries and grain boundary of P5-5 Poly-crystalline model through sections at 50 and 850 K- created ATOMSK and viewed in OVITO; Full and Sectional

**Purpose:** The subject of this study is to provide a better understanding of single- and poly-crystalline nanomaterial size and the effects of grain size in these materials on the thermal expansion coefficient (TEC). Thus, the average grain volume was kept constant by controlling the number of grains in poly-crystalline models in the same sub-series. With this control, the effect of both the structure size and the number of grains could be studied in depth at different temperatures.

**Theory and Methods:** Numerical calculations were carried out with the Molecular Dynamics Simulation method using the LAMMPS program. Interatomic relationships were defined by Embedded Atom modelling (EAM).

**Results:** The results show that there is no significant change in CTEs with increasing size in single crystal structures, however, CTEs increase with increasing temperature in all single crystal structures. This increase is more obvious at temperatures close to the melting point. The CTE curves in Figure A show that the CTE values at different grain numbers of the poly-crystalline nanostructure with constant dimensions increase and oscillate with temperature. In addition, CTE values show sudden increases at high temperatures, which is the result of grain geometry and grain boundary changes in the polycrystalline structure. From the cross-sectional images of Model P5-5 at temperatures of 50 and 850 K in Figure A, the shape of grains and grain boundaries shows the effect of temperature. The effects of temperature difference on grain geometry and grain boundaries can be seen from the differences in the A-A' and B-B' regions marked on the figure.

**Conclusion:** The results obtained by MDS calculations carried out on single and polycrystalline nanostructures have shown that; i-) MDS can be safely applied to material calculations of this scale., ii-) The change of grain shape and grain boundaries due to the effect of temperature in polycrystalline structures has effects on TGK, however, more detailed information should be obtained with further studies



## Bakırın ısı genleşme katsayısının moleküler dinamik simülasyonu ile araştırılması: Boyut ve kristal sayısının tek- ve çok-kristalli yapılar üzerindeki etkisi

Sadri Şen\*<sup>ID</sup>

Atatürk Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Makine Mühendisliği Bölümü, 25240, Yakutiye, Erzurum, Türkiye

### ÖNEÇIKANLAR

- Tek- ve çok-kristalli bakır nano yapıların termal genleşme katsayılarının hesaplanması
- Tek- ve çok-kristalli bakır nano yapıların termal genleşme katsayılarının karşılaştırılması
- Hesaplamalarda Moleküler Dinamik Simülasyon kullanımı

### Makale Bilgileri

Araştırma Makalesi

Geliş: 29.04.2024

Kabul: 08.11.2024

### DOI:

10.17341/gazimmfd.1475518

### Anahtar Kelimeler:

Bakır tek- ve çok-kristal  
Termal genleşme katsayısı,  
Moleküler dinamik  
simülasyon,  
Gömülü atom modeli

### ÖZ

Bakır, hem makro hem de nano ölçekte, sahip olduğu mekanik, elektronik, optik ve termal özelliklerin benzersiz kombinasyonu nedeniyle bilimsel ve teknolojik olarak araştırmacıların dikkatini çekmiştir. Nano ölçeklerde yapı-özellik ilişkilerinin anlaşılması, NEMS ve MEMS uygulamaları için önemlidir. Termal genleşme katsayısı (TGK) bu özelliklerden biridir. TGK için modeller tek-kristalli (TKY) ve çok-kristalli (ÇKY) olarak oluşturuldu. TKY ve ÇKY modeller, farklı boyutta 5 ana seri olarak oluşturuldu. Bunun yanında, ÇKY modellerinin her birinin farklı tane sayılı 5 farklı alt serisi bulunmaktadır. Böylece, TKY araştırmaları, farklı boyuttaki 5 model üzerinde yürütülürken, ÇKY hesaplamaları farklı boyut ve farklı tane sayılı olmak üzere 25 model üzerinde yapılmıştır. Bu çalışmalarda, TGK üzerinde; i-) TKY’de boyut değişiminin, ii-) belirli bir sabit boyuttaki ÇKY’de artan tane sayısının, iii-) farklı boyutlardaki ÇKY’de boyut artışına bağlı olarak tane sayısının etkileri incelenmiştir. Boyut ve tane sayısı değişiminin, TGK üzerindeki etkileri için hazırlanan ÇKY’lerde, farklı boyutlardaki ÇKY’lerin tane sayısı artışları, farklı boyutlardaki modellerin aynı alt serilerinde ortalama tane hacmi (OTH) aynı olacak şekilde ayarlanmıştır. Böylece, hem yapının boyutunun, hem tane sayısının ve hem de aynı ortalama tane hacminin farklı sıcaklıklarda TGK’ye etkisi derinlemesine incelenebilmiştir. Sonuçlar literatür ile iyi bir uyum göstermiştir. Moleküler Dynamics Simülasyon (MDS) ile yapılan hesaplamalarda, gömülü atom modelinin (GAM) potansiyel enerji fonksiyonu (PEF) kullanılmıştır.

## Investigation of thermal expansion coefficient of copper using molecular dynamics simulation: Effect of size and number of crystals on single- and poly-crystalline structures

### HIGHLIGHTS

- Calculation of thermal expansion coefficients of single- and poly-crystalline copper nanostructure
- Comparison of thermal expansion coefficients of single- and multi-crystalline copper nanostructures
- Use of molecular dynamics simulation in the calculations

### Article Info

Research Article

Received: 29.04.2024

Accepted: 08.11.2024

### DOI:

10.17341/gazimmfd.1475518

### Keywords:

Copper single- and poly-crystalline nanostructures,  
Thermal expansion  
coefficient, Molecular  
dynamics simulations,  
Embedded atom method

### ABSTRACT

Copper, both at macro- and nano-scales, has attracted the attention of researchers scientifically and technologically due to its unique combination of mechanical, electronic, optical, and thermal properties. Understanding the structure-property relationships at the nano-scale is important for NEMS and MEMS applications. The thermal expansion coefficient (TEC) is one of these properties. Models for TEC have been developed for single-crystal (SC) and polycrystalline (PC) copper. SC and PC models have been created in five main size series. Additionally, each PC model has five different sub-series with varying grain sizes. Thus, SC research is conducted on five different-sized models, while PC calculations are performed on 25 models with different dimensions and grain sizes. In these studies, the effects on TGK of: i) dimensional changes in TKY, ii) increasing particle count in a certain fixed size CKY, iii) particle count variations due to size increase in different CKYs have been investigated. In the CKYs prepared for assessing the effects of dimensional and particle count changes on TGK, the particle count increases in different-sized CKYs were adjusted to have the same average particle volume (APV) within the same subseries of different-sized models. Thus, the impact of both structural dimensions and particle count, as well as the same average particle volume, on TGK at different temperatures could be thoroughly examined. The results were consistent with the literature. In the calculations performed using Molecular Dynamics Simulations (MDS), the potential energy function (PEF) of the embedded atom model (EAM) was utilized.

\*Sorumlu Yazar/Yazarlar / Corresponding Author/Authors : \*sasen@atauni.edu.tr / Tel: +90 532 653 6192

## 1. Giriş (Introduction)

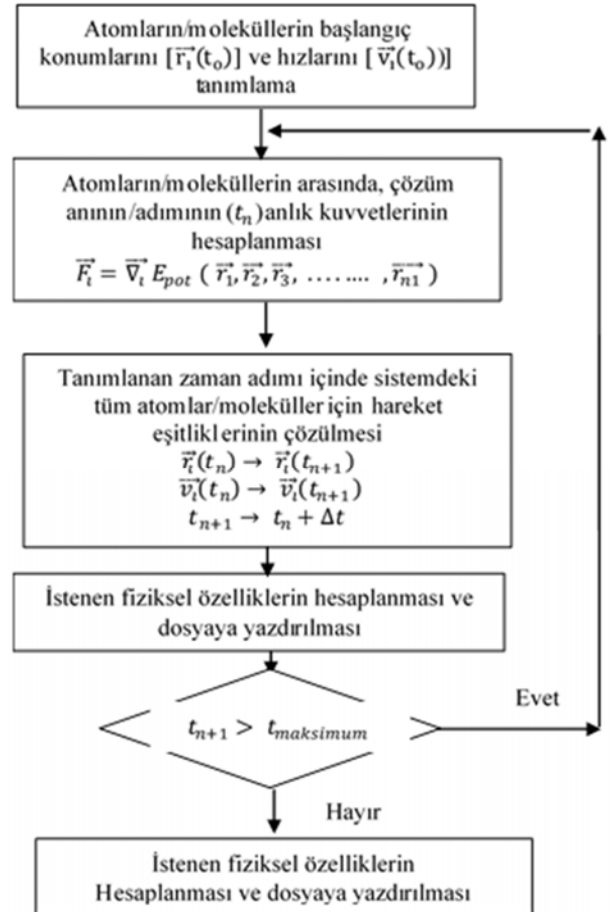
Yaklaşık 100 nm'den daha küçük boyutlara sahip malzemeler nano-malzeme olarak adlandırılır. Günümüzde nano-malzeme en cazip araştırma alanları arasındadır Çünkü bu küçük ölçekte benzersiz optik, termodinamik, manyetik, elektronik ve diğer özellikler sergilerler. Nano boyutları nedeniyle, nano-malzeme aynı malzemenin yığın tipine kıyasla belirgin farklı özelliklere sahiptir [1]. Bu değişimin temel nedeni kuantum etkisi ve daha geniş yüzey alanıdır. Parçacık boyutunun nano düzeyde küçüldüğü durumda, yüzey/hacim oranı hızlı ve keskin bir şekilde artar. Nano ölçekli malzemenin boyut ve sıcaklığa bağlı termal ve mekanik özellikleri üzerine yıllardır birçok araştırma yürütülmektedir. Nano-malzemeler, ister yapay ister doğal olarak oluşmuş olsun, 1 ila 100 nm arasında en az bir boyuta sahiptir [2]. Bunlar, nano ve mikro elektro-mekanik sistemlerde (NEMS ve MEMS) yaygın olarak kullanılmakta olup, bu alanlardaki araştırmalarda yoğun olarak incelenmektedirler. Bu çalışmada dikkate alınan bakır da hem makro hem nano boyutta teknolojik kullanımı çok yaygın olan bir malzemedir. Otomobil endüstrisinde [3], lityum-iyon batarya üretimi [4] gibi alanlarda, alaşım ve/veya başka malzemelerle alaşım halinde kullanımı arttıkça ve bu malzemelerin termal, mikro yapı ve mekanik özelliklerinin incelenmesi için araştırmalar da artmaktadır [5]. Nanoteller, nanoparçacıklar ve nanolifler gibi nano-yapıların özellikleri, ilgili ana maddenin birçok temel fiziksel, kimyasal ve diğer özelliklerinden belirgin bir şekilde farklıdır [6]. Yapılan araştırmalar nano-malzemelerin özelliklerinin anlaşılması için birçok bilginin elde edilmesine yardımcı olsa da, hem bu bilgilerin tam olarak anlaşılması hem de hala birçok açık soru olması nedeniyle yeni çalışmalara ihtiyaç duyulmaktadır. Son çalışmalar, malzeme boyutunun ve bu yapıdaki tane boyutunun TGK üzerinde etkisini göstermiştir. Bu nedenle, nano-yapılarda yapı boyutu ve tane boyutunun etkisini araştırmak için çalışmalar yapılmıştır [2, 6]. Yığın özelliklerinden farklı özellikler gösteren nano ölçekli yapılarda, ayrıca, araştırmalar, çok taneli yapıların, malzeme özellikleri (TGK, Termal iletim katsayısı gibi) üzerindeki etkilerinin en az tek taneli olanlar kadar dikkat çekici olduğunu göstermiştir. Bu bağlamda, tane boyutu ve tane sayısının etkileri üzerine yapılan son çalışmalar, TGK'nin tane boyutuna (veya mikro-yapıya) bağlı olduğunu ve bunun nano ölçekte tanelere sahip nano-kristalli malzemeler üzerinde güçlü bir etkiye sahip olduğunu açıkça göstermiştir. Tane sınırlarının beklenen azalmış kohezyonu nedeniyle, çoğu çok-kristalli katının, tanelerin boyutu azaldıkça ve tane sınırlarının oranı arttıkça gelişmiş termal genleşme sergilemesi beklenir [7]. Bununla birlikte, literatürdeki sonuçlar arasında, TGK'nin tane boyutundan bağımsız olabileceği [8, 9] veya geleneksel mikrometre tane boyutlu çok-kristallerden daha küçük veya daha büyük olabileceğine dair makaleler de bulunmaktadır. Bu araştırmalar, TGK'nin tane boyutuna bağımlılığının önemli büyüklükte olabileceğini ve bu davranışında çelişkili eğilimler ve değişiklikler görüldüğü literatürde vurgulanmaktadır [10].

Bu çalışmanın amacı, bakır malzemesinde, nano-malzeme boyutunun ve bu malzemelerdeki tane boyutunun TGK üzerindeki etkilerinin daha iyi anlaşılmasını sağlamaktır. TGK hesaplaması için farklı boyutlarda TKY ve ÇKY modelleri oluşturulmuştur. ÇKY modellerinin her biri farklı ortalama tane hacmine sahiptir, bu da alt serilerde farklı tane sayısının var olduğu anlamına gelir. ÇKY modellerinin aynı alt serisinde, tane sayısı kontrol edilerek ortalama tane hacmi sabit tutulmuştur. Böylece hem boyutun hem de tane sayısının etkisi farklı sıcaklıklarda derinlemesine incelenebilmiştir. Elde edilen sonuçlar literatürle iyi bir uyum göstermektedir [11-13]. Çalışmalar, nano ve mikro yapı hesaplamalı araştırmalarda kullanılan moleküler dinamik simülasyonu (MDS) ile gerçekleştirilmiş olup, kuvvet hesabı için gömülü atom modeli potansiyel enerji fonksiyonu-GAM PEF ile yapılmıştır.

### 1.1. Moleküler Dinamik Simülasyon –MDS (Molecular Dynamics Simulations-MDS)

İleri teknoloji uygulamalarında önemli yer bulan nano ve mikro yapıların özellikleri ve davranışları üzerine yoğun bir şekilde çalışmalar (özellikle atomik kuvvet mikroskobu gibi ileri teknoloji araştırma araçları ile) yürütülmektedir. Ancak, deneysel çalışmalarda zaman ve parasal maliyetin yüksekliği ve uç değerlerde (çok yüksek sıcaklıklar ve değişik yüklemeler) şartların oluşturulmasındaki imkansızlıklar/zorluklar, araştırmacıları hesaplamalı malzeme çalışmalarına yönlendirmiştir.

Nano ölçekteki atomik/moleküler yapı çalışmaları, süreksiz ortamlar mekaniği için geliştirilen tam teorik (DFT-Density Functional Theory, FPT-First Principle Theory, LDA-Local Density Approach) veya yarı teorik/yarı ampirik Moleküler Dinamik (MD) simülasyon gibi Kuantum Mekanik esaslı farklı yöntemlerle yürütülmektedir. MD simülasyon ile nano ölçekteki yapı elemanları üzerine, grafen benzeri C4N3'ün mekanik özelliklerinin sıcaklık ve gerinim oranıyla olan ilişkisinin incelenmesi [14] ve grafenin mekanik özellikleri üzerine Stone-Wales malzeme kusurlarındaki azot katkısının araştırılması [15] çalışmaları örnek verilebilir. Bunlara ilave olarak, seçici lazer sinterlemede poliamide dendritik bakır tozu ilavesinin etkisinin araştırılması [16] dikkat çekici uygulamadır.



Şekil 1. Moleküler Dinamik Simülasyon için genel bir algoritma  
(A general algorithm for Molecular Dynamics Simulation)

Bu çalışmada hesaplamalar Şekil 1'de genel algoritması verilen yarı ampirik yöntem olan Moleküler Dinamik Simülasyon (MDS) yöntemi

yürütülmüştür. Bu yöntemin esası, bir nanoyapının belirli bir yüklem altında, yapıdaki her atomun komşu atomlar ve varsa komşuluğundaki tanımlanmış dış ortamla ilişkisinin Newton'un hareket denklemleriyle tanımlanarak oluşturulan denklem sisteminin adım adım çözümüne dayanmaktadır. Tanımlanmış bir dış ortam belli yüklem koşullarındaki yapıyı oluşturan atomların hareketliliği, MD simülasyonlar için geliştirilen ve yarı ampirik formdaki potansiyel enerji fonksiyonlarından (PEF) elde komşu atomlarla etkileşimi tanımlayan kuvvetlerin (yani Newton'un hareket yasasında kullanılacak kuvvetler) etkisiyle gerçekleşmektedir. Literatürde ayrıntılı bilgi bulunan atom/molekül yaklaşımli iki cisim etkileşimli ve üç cisim etkileşimli durumlar için geliştirilmiş çeşitli PEF formları (Mors, Modified MORS SW-StillingerWeber, Tersoff, EAM-Embedded Atom Model (Gömülü Atom Modeli-GAM), MEAM-Modified Embedded Atom Model (Modifiye Gömülü Atom Modeli-MGAM) gibi potansiyel fonksiyonlar) bulunmaktadır. Literatürde önerilen veya deneme çalışmaları uygunluğu tespit edilen PEF'in türevlerinden kuvvetler elde edilerek hareket denklemleri çözülerek yapıdaki atomların yeni konumları belirlenir. Bu çözümler sistem dengeye gelinceye kadar devam ettirilerek kararlı durumdaki yapıya ulaşılır. Bu çalışmada Gömülü Atom Modeli Potansiyel Enerji Fonksiyonu- GAM PEF (EAM PEF-Embedded Atom Model-Potential Energy Function- PEF) kullanılmıştır.

### 1.2. Gömülü Atom Model Potansiyel Enerji Fonksiyon-GAM PEF (Embedded Atom Model-EAM PEF) [17]

Atomlar arası potansiyeller, uzayda belirli konumlara sahip bir atom sisteminin potansiyel enerjisini hesaplayan matematiksel fonksiyonlardır. Atomlar arası potansiyeller, malzeme özelliklerini açıklamak ve tahmin etmek için hesaplamalı kimya, hesaplamalı fizik ve hesaplamalı malzeme biliminde moleküler mekanik ve moleküler dinamik simülasyonlarının fiziksel temeli olarak yaygın şekilde kullanılmaktadır. Atomlar arası potansiyellerle araştırılan nicel özelliklerin ve nitel olayların örnekleri arasında kafes parametreleri, yüzey enerjileri, arayüzey enerjileri, adsorpsiyon, kohezyon, termal genleşme ve elastik ve plastik malzeme davranışının yanı sıra kimyasal reaksiyonlar yer alır. Bu çalışmada potansiyel enerji fonksiyonu olarak gömülü atom model (GAM) kullanılmıştır. Gömülü Atom tipi potansiyellerdeki enerji Eş. 1'de verildiği gibi iki kısımdan oluşur; elektrostatik çekirdek-çekirdek itmesini temsil eden  $V(r_{ij})$  fonksiyonu tarafından belirtilen bir çift potansiyel terimi ve iyon çekirdeğinin "Elektron Denizi 'ne 'gömüldüğünde" aldığı enerjiyi temsil eden  $F(\rho)$  fonksiyonu tarafından belirtilen bir kohezif terim. Bu Gömülme Enerjisi, yerel elektron yoğunluğunun bir fonksiyonudur ve bu da komşu atomlardan gelen katkıların bir süperpozisyonu olarak inşa edilir. Bu elektron transferi  $\rho$  fonksiyonu tarafından belirlenir.

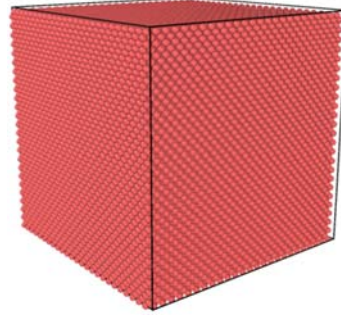
$$E_{pot} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V(r_{ij}) + \sum_i F(\rho_i) \quad (1)$$

Bu çalışmada hesaplamalar, Kaynak [18]'deki Cu'nun EAM parametreleri ile oluşturulan ve literatürde [19] bulunan Cu\_u3.eam PEF ile yapılmıştır.

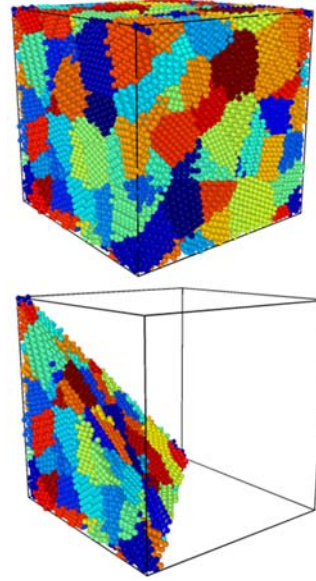
## 2. Modeller ve Hesaplamalar (Models and Calculations)

Tek ve çok kristalli yapılar ATOMSK'da elde edilmiştir ve rastgele çok kristalli yapı için Voronoi yöntemi kullanılmıştır [20]. Bunun için, yapının boyutları ve içermesi gereken tane sayısı tanımlanmıştır. Bu bilgilerle Atomsk, düğümler için rastgele konumlar ve her bir tane için rastgele kristal yönelimleri oluşturur. Tek kristalli Cu (Şekil 2) ve çok kristalli (Şekil 3) modeller Ana Seriler olarak adlandırılan beş farklı boyutta hazırlanmıştır (Tablo 1). Tablo 2'den görülebileceği gibi, aynı ana seri numarasına sahip tek ve çok kristalli yapılar yaklaşık olarak aynı hacme sahiptir. Ana Serilerdeki (Tablo 3) beş farklı boyuttaki poli-kristal modeller, Alt Seriler (Tablo 4) olarak

adlandırılan her biri beş farklı tane sayısına sahip beş alt seri halinde hazırlanmıştır. Tablodan da görüldüğü üzere, Ç1'den Ç5 kadarki modellerinin aynı alt serilerinde (Ç1-1, Ç2-1, Ç3-1, Ç4-1, Ç5-1) ortalama tane hacimleri yaklaşık olarak eşit olacak şekilde ayarlanmıştır (Tablo 3 ve 4'ün son satırında görülmektedir). MD simülasyonları için, tüm MDS modellerinde x, y ve z doğrultularında boyutlar birbirine eşit olup, üç ekseninde de periyodik sınır koşulu tanımlanmıştır. En küçük hacimli modeller olan T1 ve Ç1'de 11.000 atom bulunmaktadır ki, bu da Cu'nun sıcaklığa bağlı davranışının incelenmesi için yeterli kabul edilebilir [21]. Daha büyük boyutlara sahip diğer çok-kristal modellerde atom sayıları 11.000 atomdan daha fazladır.



**Şekil 2.** Tek-kristal ana seri T5 için model. ATOMSK'de oluşturuldu ve OVITO'da görüntülendi (Model for the single-crystal main series T5 - created at ATOMSK and imaged at OVITO)



**Şekil 3.** Çok-kristalli Ç5-5 modelin 0K'deki görüntüsü. ATOMSK'de oluşturuldu ve OVITO'da görüntülendi; Modelin tam ve kesit görüntüsü (Image of the Poly-crystalline Ç5-5 model at 0K - created in ATOMSK and imaged in OVITO; Full and cross-sectional view of the model)

**Tablo 1.** Tek-kristal ve Çok-kristal modellerin ana seri sembolleri (Symbols of the main series for single-crystal and poly-crystal models)

	Modeller / Ana Serileri				
	Seri 1	Seri 2	Seri 3	Seri 4	Seri 5
T (Tek-Kristal)	T1	T2	T3	T4	T5
Ç (Çok-Kristal)	Ç1	Ç2	Ç3	Ç4	Ç5

**Tablo 2.** Tek-kristal ve çok-kristal modellerinin ana serilerinin hacimleri  
(Volumes of the main series of single-crystal and poly-crystal models)

Modeller / Ana Seriler	Tek-Kristal ve Çok-Kristal yapıların Hacmi (A <sup>3</sup> )				
	Ana Seriler				
	1	2	3	4	5
Tek-Kristal	T1	T2	T3	T4	T5
T1, T2, T3, T4, T5	V1=50 <sup>3</sup>	V2=60 <sup>3</sup>	V3=70 <sup>3</sup>	V4=80 <sup>3</sup>	V5=90 <sup>3</sup>
Çok-Kristal	Ç1	Ç2	Ç3	Ç4	Ç5
Ç1, Ç2, Ç3, Ç4, Ç5	V1=50.61 <sup>3</sup>	V2=61.415 <sup>3</sup>	V3=68.615 <sup>3</sup>	V4=79.53 <sup>3</sup>	V5=90.375 <sup>3</sup>

**Tablo 3.** Çok-kristalli yapıların ana serileri ve alt serilerinin sembolleri ve ortalama Tane Hacimleri (OTH)  
(Symbols and Average Grain Volumes (AGV) of the main series and subseries of poly-crystalline structures)

Çok-Kristal Modeller/ Ana Seriler	Alt Seriler				
	Ana Seri 1 için	Ana Seri 2 için	Ana Seri 3 için	Ana Seri 4 için	Ana Seri 5 için
Ç1	Ç1-1	Ç1-2	Ç1-3	Ç1-4	Ç1-5
Ç2	Ç2-1	Ç2-2	Ç2-3	Ç2-4	Ç2-5
Ç3	Ç3-1	Ç3-2	Ç3-3	Ç3-4	Ç3-5
Ç4	Ç4-1	Ç4-2	Ç4-3	Ç4-4	Ç4-5
Ç5	Ç5-1	Ç5-2	Ç5-3	Ç5-4	Ç5-5
OTH (A <sup>3</sup> )	10416	8333	6944	5952	5208

**Tablo 4.** Çok-Kristalli modellerin alt serilerindeki tane sayılar ve Ortalama Tane Hacimleri (OTH)  
(Number of Grains and Average Grain Volumes AGV) of the sub-series of Poly-crystalline models)

Çok-Kristal Modeller (Ana Seri)	Alt Serilerin Tane Sayısı				
	1	2	3	4	5
Ç1	12	15	18	21	24
Ç2	21	26	31	36	41
Ç3	33	41	49	57	65
Ç4	50	61	74	86	98
Ç5	70	87	105	122	140
OTH (A <sup>3</sup> )	10416	8333	6944	5952	5208

Katı bir malzemenin doğrusal termal genleşme katsayısı-TGK-( $\alpha$ ) Eş. 2'de verildiği gibidir.

$$\alpha = \frac{1}{L} \frac{dL}{dT} \quad (2)$$

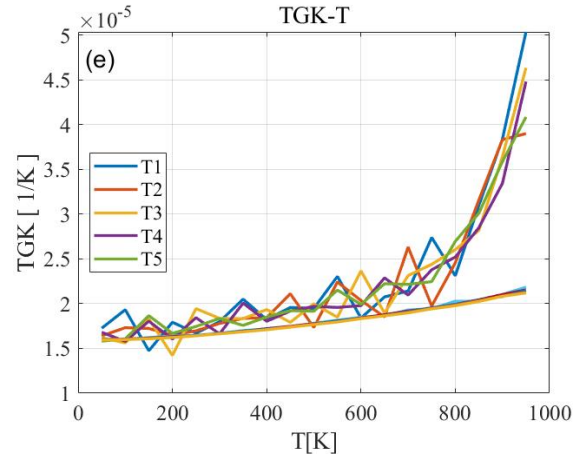
Burada L sistemin karakteristik uzunluğu (x, y veya z'deki nano-yapı uzunluğu) ve T mutlak sıcaklıktır.  $\alpha$ 'yı hesaplamak için, L(T) sıcaklığının bir fonksiyonu olarak her bir nano yapının denge karakteristik uzunluğuna ihtiyaç vardır.

L(T) değerleri ve Cu, Ag, Al gibi yapılardaki atomlar arası ilişkiyi (Potansiyel Enerji Fonksiyonu-PEF) tanımlamak ve bu yapıların fiziksel özelliklerini hesaplamak için etmek için klasik MD simülasyonlarında, yaygın olarak, Gömülü Atom Modeli (GAM) kullanılır [22-24].

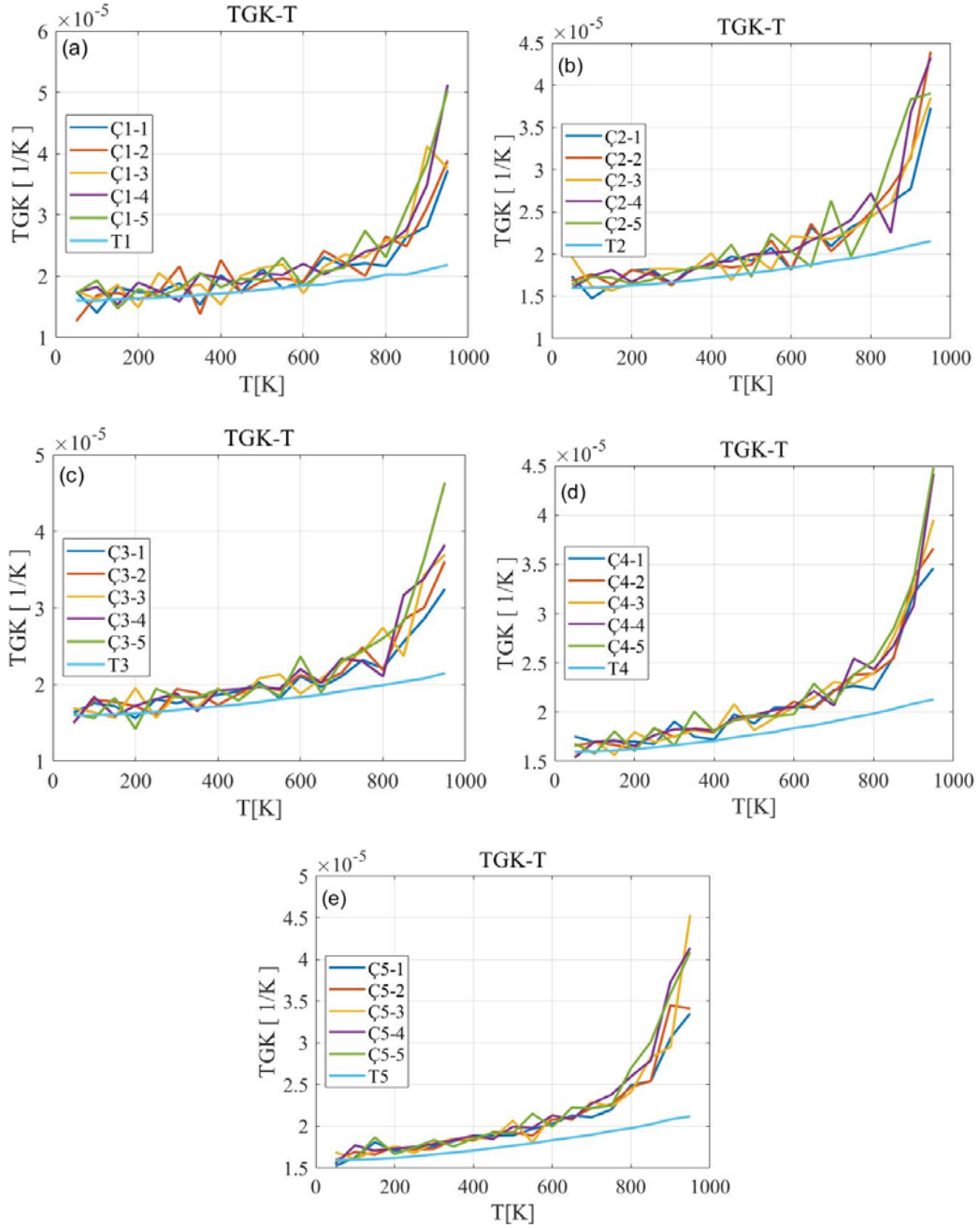
Tüm simülasyonlara, Newton'un hareket denklemleri 0,2 fs (0,002 ps) zaman adımıyla Velocity-Verlet integrasyon yöntemi ile entegre edilmiştir. Her bir simülasyon, onun için tanımlanan sıcaklıkta, NPT (sabit atom sayısı, sabit basınç ve sabit sıcaklık) toplulukları (NPT ensemble) içinde gerçekleştirilmiştir. Simülasyonlarda LAMMPS [19] paketi kullanılmıştır. TGK'nin hesaplanması için MDS'ler 50 ile 1050K arasındaki sıcaklıklarda 50K artışla gerçekleştirilmiş, ancak, sonuçlar 50-950K arası için verilmiştir.

### 3. Sonuçlar ve Tartışmalar (Results and Discussion)

Tek kristalli yapılardaki boyut etkisi (Tablo 1'deki T1'den T5'e kadar olan modeller) Şekil 4'te görülebilir. Şekilde görüldüğü gibi, tek kristal modellerin TGK değerleri tüm modellerde sıcaklık arttıkça artmaktadır. TGK'deki bu artışlar 150-950K arasında 50-150K arasındakinden daha fazladır ve TGK değerleri tüm sıcaklık değerlerinde tüm modeller için birbirine yakındır. Bu da T1'den T5'e kadar artan boyutun (Tablo 2'de verilen Model hacimleri) TGK üzerinde bir etkisi olmadığını göstermektedir. Aynı şekilde görüldüğü gibi, tüm modeller için TGK'ler 50K civarında  $1.6 \times 10^{-5}$  1/K'dir ve bu da literatürle ( $1.6 \times 10^{-5}$  1/K,  $1.7 \times 10^{-5}$  1/K) tam bir uyum içindedir [2, 25].

**Şekil 4.** Tek-kristal modellerin TGK –sıcaklık ilişkisi  
(TEC-temperature relationship of single-crystal models)

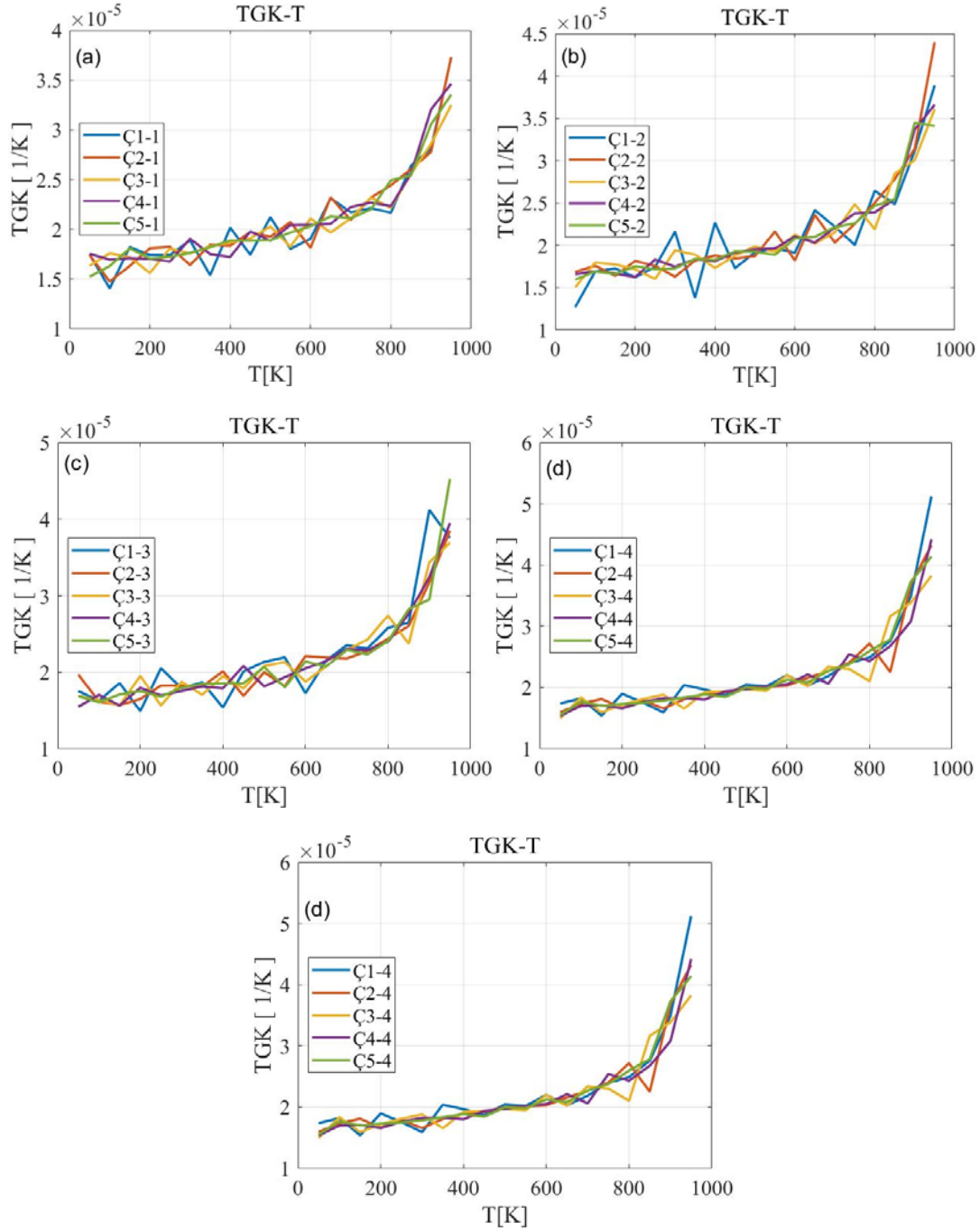
Tek kristalli modellerin en küçük boyutunun, diğer modellere kıyasla, yüksek sıcaklıklarda daha belirgin olmak üzere neredeyse tüm sıcaklıklarda kararsızlık gösterdiği belirtilmektedir (Şekil 4'teki mavi renkli eğri). Bu davranış, modelin küçük boyutunun simülasyonlarda etkili olduğunu göstermektedir.



**Şekil 5.** Tek-kristal ve çok-kristal modellerin TGK –sıcaklık ilişkisi-Ana serilerin her biri kendi arasında (TEC -temperature relationship of single-crystal and poly-crystalline models - The main series) a-) Model Ç1-1, Ç1-2, Ç1-3, Ç1-4, Ç1-5, T1; b-) Model Ç2-1, Ç2-2, Ç2-3, Ç2-4, Ç2-5, T2; c-) Model Ç3-1, Ç3-2, Ç3-3, Ç3-4, Ç3-5, T3; d-) Model Ç4-1, Ç4-2, Ç4-3, Ç4-4, Ç4-5, T4; e-) Model Ç5-1, Ç5-2, Ç5-3, Ç5-4, Ç5-5, T5

Çok-kristal yapılarda tane sayısının TGK üzerindeki etkileri Şekil 5'te görülmektedir. Bu yapılarda tane sayısının etkisini görmek için ana serilerin (Ç1, Ç2, Ç3, Ç4 ve Ç5) her birinin TGK değişimi sırasıyla Şekil 5a, b, c, d ve e'de verilmiştir. Bu grafiklerden, beş farklı nano yapı boyutunda (Ç1'den Ç5'e) tane sayısının etkisi her bir şekilde ayrı ayrı görülmektedir. Aynı boyuttaki tek kristalli ve çok kristalli yapıyı birlikte değerlendirebilmek için her birçok kristalli yapının alt serilerinin (örneğin Ç1\_1, Ç1\_2, Ç1\_3, Ç1\_4, Ç1\_5) TGK eğrileri ile aynı boyuttaki tek kristalli yapının (T1) TGK eğrisi aynı grafikte verilmiştir (Şekil 5a). Tek-kristal yapının ve aynı boyuttaki çok-kristal yapının alt serilerinin (aynı ana seride farklı sıcaklıklarda) TGK'lerinin değişimlerinin birlikte verildiği bu grafiklerde, hem aynı

boyuttaki tek ve çok kristalin etkisi birlikte incelenmiş olup hem de sabit boyuttaki çok kristallerde değişen tane sayısının (değişen ortalama tane hacmi-OTH) TGK'ye etkisi değerlendirilebilmiştir (örneğin Tablo 1-4'teki T1, Ç1-1, Ç1-2, Ç1-3, Ç1-4 ve Ç1-5, Şekil 5a'da). Şekil 5a-e'den görüldüğü gibi, TKY ve ÇKY'lerin TGK değerleri düşük sıcaklıklarda birbirine çok yakın olup, ÇKY'lerde belirli bir ortalama değer etrafında salınarak artan sıcaklıkla birlikte artmaktadır. Artış daha yüksek sıcaklıklarda daha belirgindir. Yine aynı resimden görüldüğü üzere, TGK eğrileri tüm ÇKY serilerinde benzer karakteristiklere sahip olmasına rağmen düşük sıcaklıklarda değerlerdeki salınımlar azalmakta ve birbirine yakın değişimler göstermektedir.



**Şekil 6.** Çok-kristal modellerin TGK –sıcaklık ilişkisi-alt seriler kendi aralarında (TEC -temperature relationship of single-crystal and polycrystalline models - The sub series); a-) Model Ç1-1,Ç1-2,Ç1-3, Ç1-4,Ç1-5; b-) Model Ç2-1,Ç2-2,Ç2-3, Ç2-4,Ç2-5; c-) Model Ç3-1,Ç3-2,Ç3-3, Ç3-4,Ç3-5; d-) Model Ç4-1,Ç4-2,Ç4-3, Ç4-4,Ç4-5; e-) Model Ç5-1,Ç5-2,Ç5-3, Ç5-4,Ç5-5

Tüm ÇKY'lerin TGK değerleri yaklaşık 700K'den daha yüksek sıcaklıklarda (özellikle Cu erime sıcaklığına yaklaşan yaklaşık 950K), 700K'den daha düşük sıcaklıklara kıyasla önemli bir artış göstermektedir. Bu sonuçlar, tane sayısındaki artışın artan sıcaklığa bağlı olarak TGK üzerinde sınırlı bir artış etkisine sahip olduğunu göstermektedir.

Şekil 6a-e, aynı ortalama tane hacmine sahip, ancak farklı boyutlardaki ÇKY'de farklı sıcaklıklarda artan boyutların TGK üzerindeki etkilerini görmek için oluşturulmuştur. Şekil 6a-e'nin her

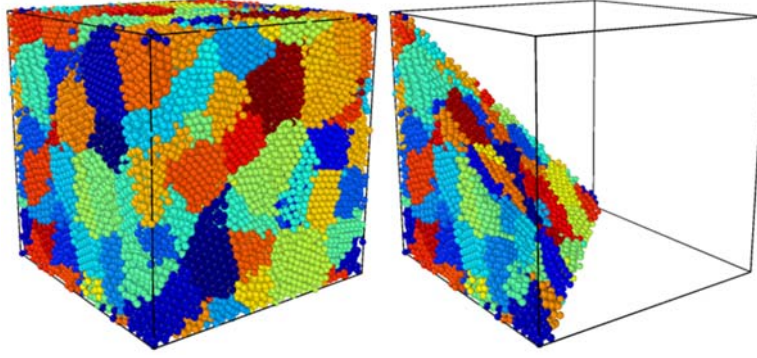
birinde, ÇKY'nin farklı ana serilerinin aynı alt serilerinde sıcaklığa bağlı TGK değerlerindeki değişimler gösterilmektedir (örneğin, Şekil 6a'da Ç1-1, Ç2-1, Ç3-1, Ç4-1 ve Ç5-1). Bu, her bir şekildedeki grafiklerin, aynı ortalama tane hacminde, yapı boyutunun artmasına bağlı olarak TGK değerlerinin değişimini gösterdiği anlamına gelmektedir. Böylece aynı ortalama tane hacminde, değişen yapı boyutunun TGK'ler üzerindeki etkisinin daha etkin bir şekilde görülmesi sağlanmıştır. Aynı resimde (Şekil 6a-e) görüldüğü gibi, ÇKY'lerin TGK değerleri her sıcaklıkta birbirine çok yakınken, artan sıcaklıkla birlikte ÇKY'lerde artmaktadır.

TGK'deki artış daha yüksek sıcaklıklarda daha belirgindir. Ayrıca, aynı resimden, TGK eğrileri tüm ÇKY serilerinde benzer özelliklere sahip olmasına rağmen, düşük sıcaklıklarda küçük boyutlu ÇKY'lerde (Şekil 6a,c'de Ç1-1, Ç2-1) TGK değerlerindeki salınımlar azalmakta ve eğriler birbirine çok yakın değişmektedir. Şekil 6d,e'de ÇKY'lerin boyutu arttıkça salınımlar da azalmaktadır. 700K'den düşük sıcaklıklara kıyasla yaklaşık 700K'den (özellikle Cu erime sıcaklığına yaklaşan yaklaşık 950K) daha yüksek sıcaklıklarda tüm ÇKY'lerin TGK değerlerinde önemli bir artış olduğu Şekil 5a-e'den de görülebilir.

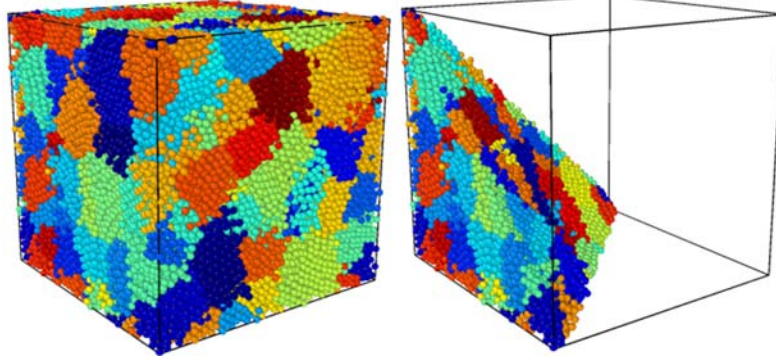
Şekil 7 ve 8'de görülen, 50 ve 850K sıcaklıklardaki Model Ç5-5'in tam ve kesit görüntülerinden, sıcaklık değişiminin taneler ve tane sınırları üzerindeki etkileri görülmektedir.

Bu şekillerden görülen, değişen sıcaklığın, tanelerin geometrisi ve tane sınırları üzerindeki etkileri, bu kesit görüntülerin birlikte yer aldığı Şekil 9 üzerinde işaretlenen A-A' ve B-B' bölgelerindeki farklılıklardan görülebilmektedir. Artan sıcaklıkla birlikte bu farklılıklar yapının boyutlarını etkileyerek TGK'sinde farklılıklara yol açmaktadır. Ayrıca sıcaklıkla değişen atomlar arası mesafenin (bağ uzunluğu) de TGK üzerinde etkisi olduğu göz ardı edilmemelidir.

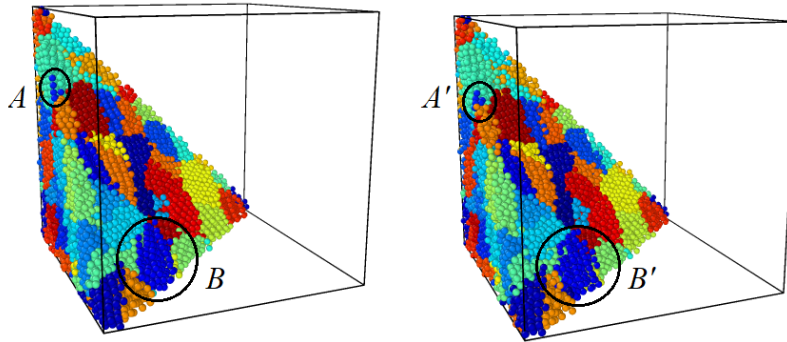
Bununla birlikte, bu çalışmanın sonuçlarının, tanelerin ve tane sınırlarının şeklinin TGK üzerindeki etkilerinin, yapıdaki tüm tanelerin ve tane sınırlarının istatistiksel ortalaması olarak yansıdığı ve tanelerin şeklinin ve tane sınırlarının etkilerinin ayrı ayrı incelenmediği göz önünde bulundurulmalıdır.



**Şekil 7.** Çok-kristal Ç5-5 modelin 50K'deki görüntüsü - ATOMSK'de oluşturuldu ve OVITO'da görüntülendi; Modelin tam ve kesit görüntüsü (Image of the poly-crystalline Ç5-5 model at 50K - created in ATOMSK and imaged in OVITO; Full and cross-sectional view of the model)



**Şekil 8.** Çok-kristal Ç5-5 modelin 850K'deki görüntüsü - ATOMSK'de oluşturuldu ve OVITO'da görüntülendi; Modelin tam ve kesit görüntüsü (Image of the poly-crystalline Ç5-5 model at 850K - created in ATOMSK and imaged in OVITO; Full and cross-sectional view of the model)



**Şekil 9.** Çok-kristal Ç5-5 modelin 50 ve 850K'deki genel görünümündeki tane sınırlarının görüntüsü - ATOMSK'de oluşturuldu ve OVITO'da görüntülendi; Tam ve kesit görünüm (Image of grain boundaries in the general view of the poly-crystalline Ç5-5 model at 50 and 850K - created in ATOMSK and imaged in OVITO; Full and cross-sectional view of the model)



#### 4. Simgeler (Symbols)

GAM PEF fonksiyonu	: Gömülü Atom Model Potansiyel Enerji
MDS	: Moleküler Dinamik Simülasyon
MD	: Moleküler Dinamik
GAM	: gömülü atom modeli
$r_i(t_0)$	: Atomların konum vektörleri
$r_i(t_0)$	: Atomların konum vektörleri
$V_i(t_0)$	: Atomların hız vektörleri
$F_i(t_0)$	: Atomların hız vektörleri
$E_{pot}$	: Sistemin oplam potansiyel enerji
$t$	: Simülasyon zamanı
$V(r_{ij})$	: İki partikülün(atomun) çekirdeklerinin etkileşim enerjisi (atomlar arası mesafenin fonksiyonu)
$F(\rho_i)$	: Atomun gömülü olduğu elektron ortamındaki etkileşim enerjisi
$\alpha$	: Termal Genleşme Katsayısı
$L, dl$	: Modelin boyutu ve boy değişimi
$T, dT$	: Simülasyon sıcaklığı ve sıcaklık değişimi

##### 4.1. Kısaltmalar (Abbreviations)

TGK	: Termal genleşme katsayısı
TKY	: tek-kristalli yapı
ÇKY	: çok-kristalli
T1,T21,T3,T4,T5	: Tek-kristal modeller
Ç1,Ç2,Ç3,Ç4,Ç5	: Çok-Kristal modellerin ana serileri
Ç1-1,Ç1-2,Ç1-3,Ç1-4,Ç1-5	: Çok-kristalli modellerin alt serileri (1.çok kristalli ana serinin alt modelleri)
Ç2-1,Ç2-2,Ç2-3,Ç2-4,Ç2-5	: Çok-kristalli modellerin alt serileri (2.çok kristalli ana serinin alt modelleri)
Ç3-1,Ç3-2,Ç3-3,Ç3-4,Ç3-5	: Çok-kristalli modellerin alt serileri (3.çok kristalli ana serinin alt modelleri)
Ç4-1,Ç4-2,Ç4-3,Ç4-4,Ç4-5	: Çok-kristalli modellerin alt serileri (4.çok kristalli ana serinin alt modelleri)
Ç5-1,Ç5-2,Ç5-3,Ç5-4,Ç5-5	: Çok-kristalli modellerin alt serileri (5.çok kristalli ana serinin alt modelleri)
OTH	: Ortalama Tane Hacimleri

#### 5. Sonuçlar (Conclusions)

TGK hesaplaması için modeller tek-kristal (TGY) ve çok-kristalli (ÇKY) olarak modellenmiştir. TKY ve ÇKY modeller 5 farklı boyutta 5 ana seri olarak oluşturulmuştur. ÇKY modellerinin her biri de 5 farklı alt seriyeye sahiptir. ÇKY modellerinin aynı alt serilerinde tane sayısı kontrol edilerek ortalama tane hacmi sabit tutulmuştur. Böylece hem boyutun hem de tane sayısının etkisi farklı sıcaklıklarda derinlemesine incelenebilmiştir. Elde edilen sonuçlar literatür ile iyi bir uyum göstermektedir. Bu iyi uyum, simülasyon parametrelerinin, yani simülasyon toplam süresinin, zaman adımlarının, termodinamik toplulukların (NPT) ve potansiyel enerji fonksiyonunun yeterince uygun bir şekilde belirlendiğini göstermektedir. Termodinamik topluluk, klasik ve kuantum mekaniği yasaları aracılığıyla bir sistemin termodinamik özelliklerini türetmek için bir yol sağlar. Simülasyonun iyi sonuçlar vermesi için bu parametrelerin uygun şekilde seçilmesi son derece önemlidir.

Tek kristalli yapılarda artan boyutla birlikte TGK değerlerinde önemli bir değişiklik olmamakla birlikte, tüm tek kristalli yapılarda artan sıcaklıkla birlikte TGK değerleri artmaktadır. Bu artış erime noktasına yakın sıcaklıklarda daha belirgindir.

Çok kristalli yapılarda, belirli boyuttaki yapının tane sayısındaki artış (ortalama tane çapı azaldıkça) aynı sıcaklıkta TGK'larda bir değişikliğe neden olmamıştır. Ayrıca artan sıcaklığa bağlı olarak TGK'lar da artmıştır. Ortalama tane hacminin sabit olduğu farklı

boyutlardaki çok-kristal yapılarda TGK değerleri birbirine yakındır. Ancak düşük sıcaklıklarda küçük boyutlu yapıların değerlerinde dalgalanmalar gözlenmiştir. Yapı boyutu arttıkça dalgalanma azalmaktadır. Sonuç olarak simülasyon parametrelerinin iyi belirlenmesi durumunda MDS ile kabul edilebilir sonuçlar elde etmek mümkündür.

Literatürdeki çalışmalarda, bu çalışmada olduğu gibi, tüm yapıdaki tanelerin ve tane sınırlarının etkilerinin istatistiksel ortalamasının TGK üzerindeki etkileri birlikte değerlendirilmiştir. Tanelerin şekli ve tane sınırlarının şeklinin TGK üzerindeki etkilerinin toplam etki içindeki oranını belirlemek oldukça zordur. Ancak detaylı çalışmalar yapılarak daha detaylı bilgiler elde edilebilir.

#### Teşekkür (Acknowledgement)

Bu yazıda bildirilen sayısal hesaplamalar tamamen/kısmen TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Performans ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TRUBA kaynakları) yapılmıştır.

#### Kaynaklar (References)

- Kolahal L.A., Viswanath I.V.K., Diwakar B.S., Govindh, B., Reddy, V., Murthy, Y.L.N., Review on nanomaterials: Synthesis and applications, Mater. Today Proc., 18 (2), 2182-2190, 2019.
- Olsson P.A.T., Awala O. I., Holmberg-Kasa, J., Krause, A.M., Tidefelt, M.T., Vigstrand O. and Music, D., Grain Size-Dependent Thermal Expansion of Nanocrystalline Metals, Materials, 16 (4), 396-408, 2023.
- Temiz C., Yılmaz F., Kölemen U., Investigation of microstructures and mechanical properties of Sc doped Al-5Cu alloys, 37 (1), 75-88, 2022.
- Türkakar G., Hoş İ., Numerical investigation of lithium-ion battery thermal management using fins embedded in phase change materials, 38 (2), 1105-1116, 2023.
- Ercan E., Dağdelen F., Effects of high temperature applied to CuAlTi alloy in air atmosphere on thermodynamic parameters and microstructure, 37 (3), 1225-1235, 2022.
- Pathak S., Shenoy V.B., Size dependence of thermal expansion of nanostructures, Physical Review, B 72, 113404-1113404-1, 2005.
- Daniel R., Holec C., Boltasik M., Keckes J., Mitterer C., Size effect of thermal expansion and thermal/intrinsic stresses in nanostructured thin films: Experiment and model, Acta Mater., 59 (17) 6631-6645, 2011.
- Eastman J.A., Fitzsimmons M.R., Thompson L.J., The thermal properties of nanocrystalline Pd from 16 to 300 K, Philos. Mag. B, 66 (5), 667-696, 1992.
- Turi T., Erb, U., Thermal expansion and heat capacity of porosity-free nanocrystalline materials, Mater. Sci. Eng. A, 204 (1-2), 34-38, 1995.
- Fang W., Lo C.-Y., On the thermal expansion coefficient of thin films, Sens. Actuator, A Phys., 84 (3), 310-314, 2000.
- Zhou X.-Y., Huang B.-L., Zhang T.-Y., Size-and temperature-dependent Young's modulus and size-and temperature-dependent thermal expansion coefficient of thin films, Phys. Chem. Phys., 18, 21508-21517, 2016.
- Wang K., Reeber R.R., Thermal Expansion of Copper, High Temperature and Materials Science, 35, 181-186, 1996.
- Mishin Y., Mehl M.J., Voter A.F., Kress J.D., Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations, Physical Review B., 63 (22), 24106-1-24106-16, 2001.
- Senturk A.E., The influence of temperature and strain rate on the mechanical properties of graphene-like C4N3 structure, Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University, 37 (3) 1483-1491, 2022.
- Şenturk A.E., Ökten A.S., Konukman A.E.Ş., Investigation of the effects of nitrogen doping within different sites of Stone-Wales defects on the mechanical properties of graphene by using a molecular Dynamics simulation method, Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University, 34 (1), 69-78, 2019.
- Bekem A., Özbay B., Bulduk M.E., Effect of dendritic copper powder addition to polyamide 12 in selective laser sintering, Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University 36 (1), 421-431, 2021.

17. Foiles S.M, Baskes M.I., Daw M.S., Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, *Physical Review B*, 63 (12), 7983-7991, 1986.
18. Associate Principle Wiss, Jannes, Elstner Associates, Inc. <https://www.wje.com/knowledge/articles/detail/wje-primer-coppers-coefficient-of-thermal-expansion-varies-but-to-little-effect>. Yayın tarihi 1996. Erişim tarihi Nisan 1, 2023.
19. Sandia National Laboratories, <https://www.sandia.gov/ccr/focus-area/molecular-dynamics/>. Yayın tarihi 2018. Erişim tarihi Nisan 1, 2023.
20. ATOMSK, Atomsk is maintained by Pierre Hirel at the University of Lille, Sciences and Technologies, <https://atomsk.univ-lille.fr/index.php>. Yayın tarihi 2010. Erişim tarihi Nisan 1, 2023.
21. Alper H.E., Politzer P., Molecular Dynamics Simulations of the Temperature-Dependent Behaviour of Aluminium, Copper and Platinum, *Int. J. of Quantum Chemistry*, 76 (5), 670-676, 2000.
22. Stepanyuk O.V., Alekseev D.B., Saletskii A.M., Calculation of the Thermodynamic Properties of Copper by Molecular Dynamics Simulations, *Moscow University Physics Bulletin*, 64 (2), 226-227, 2009.
23. Daw M.S., Baskes M.I., Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces and other defects in metal, *Physical Review B*, 29 (12), 6443-6453, 1984.
24. Folies S.M., Baskes M.I., Daw, M.S., Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, *Physical Review B*, 33 (12), 7983-7991, 1986.
25. Bogatyrenko S., Kryshtal A., Thermal expansion coefficients of Ag, Cu and diamond nanoparticles: In situ TEM diffraction and EELS measurements, *Materials Characterization*, 178, 111296-1-11296-6, 2021.