

# Обчислювальний експеримент в матеріалознавстві

---

УДК 539.2

## Обчислення лінійного коефіцієнта термічного розширення багатоелементних, однофазних металевих сплавів з перших принципів

А. В. Хачатрян\*

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України  
вул. Кржижановського, 3, 03142, Київ, Україна  
E-mail: [khachatryan.h.v@gmail.com](mailto:khachatryan.h.v@gmail.com)

*За допомогою методу псевдопотенціалу і квазігармонійного наближення обчислено лінійні коефіцієнти термічного розширення (ЛКТР) багатоелементних металевих сплавів. Температурна залежність ЛКТР після апроксимації результатів обчислювального експерименту представлена в аналітичній формі. Проведено порівняння отриманих результатів з відомими табличними даними. Для підтвердження надійності моделі обчислення проводили і для ряду чистих металів. Різниця розрахункових і табличних даних не перевищувала 7,3%.*

**Ключові слова:** енергія електрон-іонної системи, потенціал міжатомної взаємодії, силові постійні, квазігармонійне наближення, коефіцієнт термічного розширення.

### Вступ

Однією з важливих характеристик металів і багатоелементних металевих сплавів є коефіцієнт лінійного термічного розширення. Для розрахунків жорсткості і міцності різних конструкцій, для визначення залишкових напруг, зносостійкості і інших експлуатаційних властивостей матеріалів потрібне знання величин і температурної залежності КТР для оцінки їх працездатності в екстремальних умовах експлуатації.

Експериментальне визначення теплових характеристик матеріалів є проблемою для багатоелементних сплавів і матеріалів зі складною структурою. У публікаціях є розбіжності даних щодо температурної залежності фізико-механічних характеристик [1—4].

Відзначимо, що останнім часом з'являються статті, в яких поєднуються експериментальні і теоретичні дослідження температур Дебая і ЛКТР багатоелементних сплавів [2—4]. Часто для оцінки температурної залежності тієї чи іншої фізичної характеристики сплавів використовують емпіричні формули із застосуванням методу підгонки під деякі відомі експериментальні дані [2, 3]. Аналіз результатів цих робіт

підтверджує складність визначення температурної залежності фізико-механічних характеристик металевих сплавів, як експериментально, так і теоретично. Мета роботи — оцінити лінійний коефіцієнт термічного розширення багатоеlementних металевих однофазних сплавів з кубічною кристалічною граткою з перших принципів (метод апіорного псевдопотенціалу [5]).

### Теорія

Одним з можливих способів обчислення коефіцієнта термічного розширення є метод, заснований на визначенні залежності повної енергії електрон-іонної системи від параметрів кристалічної гратки за різних температур [6].

Обчислення енергії електрон-іонної системи в другому порядку теорії збурень по псевдопотенціалу означає використання гармонійного наближення. Але застосування такого наближення в динаміці гратки недостатньо для обчислення деяких фізичних характеристик, які пов'язані зі зміною об'єму кристалічної гратки з підвищенням температури. У той же час відомо, що обчислення коливальної частини відповідних термодинамічних функцій з урахуванням ангармонізму виявляються найбільш складними [7]. Ці труднощі можна подолати, якщо зробити спрощуючі припущення про залежність частот коливання від температури і об'єму.

Повну енергію кристалічного матеріалу можна уявити як суму енергії електрон-іонної системи за температури  $T = 0$  і енергії теплових коливань іонів за температури  $T \neq 0$ . Енергію електрон-іонної системи за умови  $T = 0$  в рамках методу псевдопотенціалу в другому порядку теорії збурень можна записати у вигляді [8]

$$U = U_0 + U_s, \quad (1)$$

де  $U_0$  залежить від об'єму елементарної комірки та включає кінетичну, обмінно-кореляційну енергії і енергію вільного електронного газу, а також поправки до енергії в першому порядку теорії збурень по псевдопотенціалу. Другий доданок  $U_s$  (поправки другого порядку) являє енергію зонної структури і електростатичну енергію. Енергія зонної структури описує взаємодію між іонами через взаємодію валентних електронів [9]:

$$U_{bs} = \sum_q \sum_m \sum_n \exp\left[i\vec{q}(\vec{R}_m - \vec{R}_n)\right] V^2(q) \chi(q) \varepsilon(q). \quad (2)$$

Фігуруючі тут функції  $\varepsilon(q)$  і  $\chi(q)$  описують обмінно-кореляційні ефекти і визначені в роботі [9] ( $\vec{R}_m$  і  $\vec{R}_n$  — радіуси-вектори іонів).

Енергія зонної структури (2) в сукупності з потенціалом прямої взаємодії описує повну взаємодію між іонами:

$$\Phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = \frac{z^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} + \frac{2\Omega_o}{(8\pi)^2} \int \exp(i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)) U_{bs}(q) d\vec{q}, \quad (3)$$

де  $\Omega_0$  — середній об'єм атома в елементарній комірці;  $R = |\vec{R}_i - \vec{R}_j|$  — відстані між атомами  $i$  та  $j$ . Енергію взаємодії між іонами можна представити у вигляді суми парних міжатомних потенціалів

$$U_s = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \Phi(|\vec{R}_i - \vec{R}_j|), \quad (4)$$

де  $N$  — число атомів в представницькому об'ємі [9].

Енергію теплових коливань в загальному випадку для матеріалів, що мають складну структуру, пропонується обчислювати в рамках моделі Ейнштейна [10], яка, на відміну від моделі Дебая, що досить добре працює для простих кристалічних ґраток, але призводить до нестійких обчислювальних схем для складних структур, дає надійні результати розрахунків. Для розгляду ґратки з базисом необхідно взяти до уваги також оптичні коливання. Частота їх мало залежить від хвильового вектора, і тому тут краще застосовувати модель Ейнштейна, в якій всім коливанням приписується одна і та ж частота для енергії теплових коливань (на одну молекулу) за температури  $T$ . Відповідно до моделі Ейнштейна [10] атоми в кристалічній ґратці коливаються з однаковою частотою, значення якої пропорційне жорсткості матеріалу. Середнє значення енергії коливання ґратки визначається рівністю

$$U_T = \sum_q \frac{h\varpi_q}{\exp(h\varpi_q/kT) - 1}, \quad (5)$$

де підсумовування ведеться за всіма типами коливань, і  $\omega_q$  — частота коливань (відповідно до моделі Ейнштейна  $\omega_q = \omega$  для всіх  $q$ ). У разі структури з  $n$  атомами в елементарній комірці є  $3Nn$  коливань ( $N$  — число комірок в об'ємі матеріалу) і частота коливань визначається зі співвідношення

$$\varpi = \sqrt{2\alpha^*/M}. \quad (6)$$

Тут  $M$  маса атома,  $\alpha^*$  — силова постійна, яка визначається через другу похідну енергії міжатомної взаємодії по просторовій змінній

$$\alpha^* = \left( \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right). \quad (7)$$

Спочатку обчислюємо силові постійні  $\alpha_0^*$  за умови  $T = 0$ . Енергію теплових коливань (3), розраховану за малих значень температури ( $T_1 = \Delta T$ ;  $\Delta T \rightarrow 0$ ) з силовими постійними  $\alpha_0^*$ , додаємо до значення енергії  $U$ . В наступних кроках для обчислення повної енергії в рамках гармонійного наближення використовуємо нові силові постійні і, отже, частоти, залежні від об'єма.

Схематично рішення поставленого завдання можна представити таким чином.

1. За мінімумом енергії електрон-іонної системи  $U(a, c)$  визначаються параметри ґратки ( $a_0, c_0$ ) і силові постійні  $\alpha_0^*$  за умови  $T = 0$  в рівноважному стані кристала.

2. Обчислюється повна енергія системи з урахуванням енергії теплових коливань за температури  $T \neq 0$ . Використовуємо значення силових постійних, отриманих за умови  $T = 0$ .
3. З зіставлення значення енергії визначаються нові значення параметрів кристалічної ґратки. Тут  $a_i, c_i$  — параметри кристалічної ґратки з урахуванням енергії теплових коливань атомів.

У разі багатоелементних сплавів псевдопотенціал системи можна записати у вигляді [11]

$$\bar{V}(q) + \sum_i C_i V_i(q), \quad (8)$$

де  $C_i$  і  $V_i(q)$  — концентрація і псевдопотенціал  $i$ -го елемента.

В результаті обчислення повної енергії електрон-іонної системи з псевдопотенціалу (1) отримуємо фізичні характеристики кристала з ідеальною ґраткою, в вузлах якої знаходяться атоми з інтегральними характеристиками. У цьому випадку значення розрахункового параметра і тип кристалічної ґратки збігаються з експериментальними даними. В реальності кристалічні ґратки високоентропійних сплавів не мають єдиних параметрів. Як в теорії, так і в експерименті маємо усереднені величини.

Розроблена модель в квазігармонійному наближенні дозволяє обчислити параметри кристалічної ґратки в процесі температурного розширення, а в подальшому і відповідні значення фізико-механічних властивостей матеріалів.

### Результати обчислень та їх обговорення

За мінімумом енергії  $U = U(\Omega(T))$  визначаємо параметр ґратки в рівноважному стані залежно від температури. Коефіцієнт термічного розширення обчислюємо за формулою

$$\alpha = \frac{a_T - a_0}{T \cdot a_0}. \quad (9)$$

Тут  $a_0, a_T$  — параметри кристалічної ґратки в рівноважному стані за нульової та поточної температур відповідно.

У табл. 1, 2, представлено значення лінійних коефіцієнтів термічного розширення для деяких сплавів з ГЦК і ОЦК структурами, розраховані за допомогою формули (9), в дужках наведено експериментальні значення ЛКТР для сплавів з ГЦК [2] і ОЦК структурами [4], для металів табличні дані взяті з роботи [12].

Розрахункові дані ЛКТР для сплавів на основі нікелю знаходяться в згоді з експериментальними даними [2], за винятком сплаву NiCoFe. Згідно з експериментальними даними [2], сплав FeCoNi має майже постійний ЛКТР за температур вище 200 К. Це пояснюється тим, що FeCoNi є двофазним сплавом з ОЦК і ГЦК структурами. За результатами наших розрахунків значення ЛКТР сплаву FeCrCoNiGa добре узгоджується з експериментальними даними роботи [4] до температури 750 К поки система має ОЦК структуру (табл. 2), а за температур вище 750 К в експерименті спостерігається значний приріст коефіцієнта термічного розширення, зумовлено можливим ОЦК  $\rightarrow$  ГЦК структурним переходом.

**Т а б л и ц я 1. Лінійні коефіцієнти термічного розширення нікелю і його сплавів з ГЦК структурою**

T, K	$\alpha \cdot 10^6, K^{-1}$						
	Ni	NiCo	NiCoCr	NiCoFe	NiCoCrFe	NiCoCrFeMn	CoNiMn
100	9,04	8,98	9,28	9,1	10,03	10,885	11,19
200	10,75	10,68	11,03	10,77	11,929	12,945	13,31
300	11,89 (11,75)	11,81 (12)	12,21 (13)	11,92 (12)	13,2 (14,2)	14,32	14,73
400	12,78	12,70	13,12	12,81	14,19	15,39	15,83
500	13,51	13,42	13,87	13,55	15,0	16,277	16,738
600	14,14 (14,60)	14,05 (14)	14,52 (14,8)	14,18	15,7 (16,3)	17,036	17,518
700	14,70 (14,98)	14,62 (14,5)	15,09 (15)	14,74 (12,5)	16,317 (16,5)	17,706	18,2
800	15,28	15,11	15,62	15,24	16,87	18,307	18,82
1000	16,07 (16,03)	15,96	16,49	16,16	17,84	19,357	19,9
1200	16,82	16,13	16,78	16,85	18,67	20,26	20,83

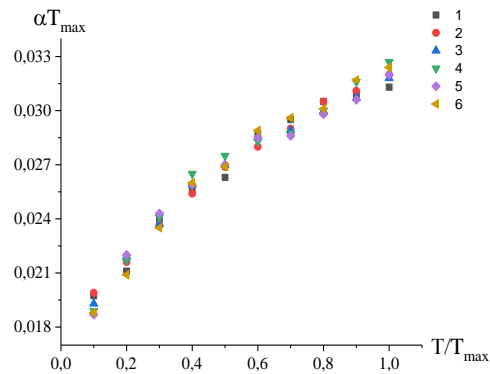
**Т а б л и ц я 2. Лінійні коефіцієнти термічного розширення Fe і ВЕС сплавів з ОЦК структурою**

T, K	$\alpha \cdot 10^6, K^{-1}$				
	Fe	TiZrVNbTa	WNbMoTaV	TiZrVNbTaMo	FeCrCoNiGa
50	7,20	5,13	4,00	4,87	8,70
100	8,56	6,10	4,76	5,80	10,34
200	10,19	7,26	5,66	6,90	12,30
300	11,27 (11,10)	8,03	6,26	7,63	13,60 (13,3)
400	12,11 (12,15)	8,63	6,73	8,20	14,63
500	12,80	9,13	7,11	8,67	15,47
600	13,40	9,55	7,44	9,07	16,19 (16,2)
700	13,93 (13,80)	9,93	7,74	9,43	17,12 (17,3)
800	14,40	10,26	8,00	9,75	17,43 (18,3)
1000	15,23	10,85	8,46	10,31	18,42
1200	15,94	11,36	8,85	10,79	19,37
1400	16,57	11,80	9,20	11,21	20,12
1600	17,13	12,20	9,51	11,59	

Має місце зв'язок між розрахованими значеннями ЛКТР і температурою плавлення матеріалу. Наприклад, NiCoCr і NiCoCrFe, Ni і NiCoFe, NiCoCrFeMn і FeCrCoNiGa, Nb і WNbMoTaV мають близькі значення ЛКТР і близькі значення температур плавлення.

Для металів і багатоеlementних однофазних сплавів на рисунку представлена залежність функції  $Y = \alpha \cdot T_{\max}$  від параметра  $T/T_{\max}$ , яка має однаковий вигляд для всіх однофазних багатоеlementних металевих сплавів.

Рис. 1. Залежність  $\alpha \cdot T_{\max}$  від гомологічної температури для матеріалів Ni (1), NiCoCr (2), MiCoCrFe (3), Fe (4), TiZrVNBa (5), WNBMoTaV (6).



В результаті обчислювального експерименту отримано дві апроксимуючі функції, що описують функціональну залежність  $Y = \alpha \cdot T_{\max}$  від параметра  $x = T/T_{\max}$ :

$$Y = \alpha \cdot T_{\max} = 0,03 - 0,01966 \cdot \exp(-3,833T/T_{\max}) \quad (10)$$

або

$$\alpha \cdot T_{\max} = 0,032(T/T_{\max})^{1/4} \quad (11)$$

Формула (10) близька до емпіричної формули, яка була введена в роботі [13] для опису температурної залежності ЛКТР аустенітної сталі в діапазоні температур 100—1600 К, з тією лише різницею, що замість параметра  $T_{\max}$  використано температуру Дебая. Для вибору апроксимуючої функції в другому випадку було використано емпіричне співвідношення  $\alpha = 0,1323T_{\max}^{-5/4}$  для оцінки ЛКТР металів за кімнатної температури, запропоноване в роботі [14]. Друга апроксимація має більш простий вигляд. Результати, отримані за допомогою апроксимації (5) і (6), узгоджуються на 99,5%.

### Висновки

Спостерігається узгодженість розрахункових і експериментальних даних по ЛКТР однофазних сплавів, обчислених з перших принципів.

Запропонована модель обчислення ЛКТР багатоелементних сплавів адекватно відображає результати теплового розширення матеріалів з огляду на такі ефекти, як фазові переходи або поява другої фази.

В результаті апроксимації результатів обчислень ЛКТР з перших принципів представлено аналітичну формулу коефіцієнта термічного розширення, що залежить від температури плавлення матеріалів.

### Цитована література

1. Zhenggang Wu. Temperature and Alloying Effects on the Mechanical Properties of Equiatomic FCC Solid Solution Alloys. PhD diss., University of Tennessee, USA, 2014. 125 p.
2. Laplanche G., Gadaud P., Bärsch C., Demtröder K., Reinhart C., Schreuer J., George E.P. Elastic moduli and thermal expansion coefficients of medium-entropy subsystems of the CrMnFeCoNi high-entropy alloy. *J. Alloys Comp.* 2018. V. 746, P. 244-255. doi: [10.1016/j.jallcom.2018.02.251](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2018.02.251)
3. Hang Sh., Vida A., Heczal A., Holmstron E., Vitos L. Thermal expansion, elastic and magnetic properties of FeCoNiCu-based high-entropy alloys using first-

- principle theory. *JOM*. 2017. V. 69, No. 11. P. 2012-2017. doi: 10.1007/s11837-017-2565-6
4. Hang Sh., Vida A., Wei Li. Thermal expansion in FeCrCoNiGa high-entropy alloy from theory and experiment. *Appl. Phys. Lett.* 2017. V. 110 (24): 241902. doi: 10.1063/1.4985724 View online: <https://doi.org/10.1063/1.4985724>.
  5. Закарян Д.А. Першопринципні методи розрахунку фізичних характеристик тугоплавких бінарних евтектичних композитів. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора за спеціальністю фізика твердого тіла. / Інститут проблем матеріалознавства Національної академії наук України, Київ, 2018. 280 с.
  6. Закарян Д.А., Картузов В.В., Хачатрян А.В. Модель квазигармонического приближения в теории псевдопотенциалов. *Допов. НАН Укр.* 2016, № 4. С. 55—61. <http://dx.doi.org/10.15407/dopovidi2016.04.055>.
  7. Белан-Гайко Л.В., Богданов В.И., Фукс Д.Л. Расчет упругих и тепловых свойств щелочных металлов методом псевдопотенциала. *Изв. вузов.* 1979. № 2. С. 25—38.
  8. Zakaryan D., Kartuzov V., Kartuzov E., Khachatryan A., and Sair A. Calculation of composition in LaB<sub>6</sub>-TiB<sub>2</sub>, LaB<sub>6</sub>-ZrB<sub>2</sub> eutectics by means of pseudopotential method". *J. European Ceramic Soc.* 2011. V. 31, No. 7. P. 1305—1308. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2011.01.023
  9. Хейне В., Коэн М., Уейр Д. Теория псевдопотенциала. Москва: Мир, 1973. 640. с.
  10. Китель Ч. Введение в физику твердого тела. Москва: Наука, 1976. 790 с.
  11. Закарян Д.А., Картузов В.В., Хачатрян А.В. Вычисление базовых физико-механических характеристик высокоэнтропийных металлических сплавов. Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. 2015. № 17. С. 56—61.
  12. Новицкий Л., Кожевников И. Теплофизические свойства материалов при низких температурах. Москва: Машиностроение, 1975. 345 с.
  13. S.M.C. van Bohemen. The nonlinear lattice expansion of iron alloys in the range 100—1600 K. *Scripta Materialia.* 2013. V. 69. P. 315—318. <http://dx.doi.org/10.1016/j.scriptamat.2013.05.009>
  14. Рябухин А.Г. Линейный коэффициент теплового расширения металлов. Физическая химия и технология неорганических материалов. 1999. № 3. С. 15—17.

### References

1. Zhenggang, Wu (2014). Temperature and Alloying Effects on the Mechanical Properties of Equiatomic FCC Solid Solution Alloys. (PhD diss.). University of Tennessee, USA.
2. Laplanche, G., Gadaud, P., Bärsch, C. & Demtröder, K., Reinhart, C., Schreuer, J., George, E.P. (2018). Elastic moduli and thermal expansion coefficients of medium-entropy subsystems of the CrMnFeCoNi high-entropy alloy. *J. of Alloys and Compounds*, V. 746, P. 244-255. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2018.02.251>
3. Hang, Sh., Vida, A., Heczal, A. & Holmstron, E., Vitos L.(2017). Thermal Expansion, Elastic and Magnetic Properties of FeCoNiCu-Based High-Entropy Alloys Using First-Principle Theory. *JOM*, V.69, No 11, P. 2012-2017. <https://doi.org/10.1007/s11837-017-2565-6>
4. Hang, Sh., Vida, A., Wei, Li. (2017). Thermal expansion in FeCrCoNiGa high-entropy alloy from theory and experiment. *Appl. Phys. Lett.*, V. 110, (24): 241902. DOI: 10.1063/1.4985724 View online: <https://doi.org/10.1063/1.4985724>.
5. Zakarian D.A. Pershopryntsydni metody rozrakhunku fizychnykh kharakterystyk tuhoplavkykh bynarynykh evtektichnykh kompozytiv. Dysertatsiia na zdobuttia

- naukovoho stupenia doktora za spetsialnistiu fizyka tverdoho tila. / Instytut problem materialoznavstva Natsionalnoi akademii nauk Ukrainy, Kyiv, 2018. 280 p.
- Zakarian, D., Kartuzov, V., Khachatrian, A. (2016). Quasiharmonic approximation model in the theory of pseudopotentials. *Dopov, Nac. Akad. nauk. Ukr.*, V. 4. P. 55-61 [in Russian]. <https://doi.org/10.15407/dopovidi2016.04.055>
  - Belan-Gaiko, L.V., Bogdanov, V.I., Fuks, D.L. (1979). Calculation of elastic and thermal properties of alkali metals by the pseudopotential method. *Izvestiya Vuzov*, No 2. P. 25-38. [in Russian]. <https://doi.org/10.1007/BF00892002>
  - Zakaryan, D., Kartuzov, V., Khachatrian, A. & Sair, A. (2011). Calculation of composition in LaB<sub>6</sub>-TiB<sub>2</sub>, LaB<sub>6</sub>-ZrB<sub>2</sub> eutectics by means of pseudopotential method". *J. European Ceramic Society*, V. 31, No. 7, P. 1305-1308. <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2011.01.023>
  - Heine W., Cohen M., Weir D. *Pseudopotential Theory*. (1973). Moskva. Mir. [in Russian].
  - Kittel Ch. *Introduction to Solid State Physics*. (1976). Moskva. Nauka. [in Russian].
  - Zakaryan, D.A., Kartuzov, V.V., Khachatrian, A.V. (2015). Calculation of the basic physical and mechanical characteristics of high-entropy metal alloys. *Matematicheskiye modeli i vychislitel'nyy eksperiment v materialovedenii*, V.17, P. 56-61. [in Russian].
  - Novitskiy L. Kozhevnikov I. *Thermophysical properties of materials at low temperatures*. (1975). Moskva. Mashinostroyeniye [in Russian]. <http://thermalinfo.ru/svoystva-materialov/metally-i-splavy/koeffitsienty-teplovogo-rasshireniya-kr-metalloy>
  - Van Bohemen, S.M.C. (2013). The nonlinear lattice expansion of iron alloys in the range 100-1600 K. *Scripta Materialia*, V. 69, P. 315-318. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2013.05.009>
  - Ryabukhin, A.G. (1999). Linear coefficient of thermal expansion of metals. *Fizicheskaya himiya i tehnologiya neorganicheskikh materialov*, V. 3, P. 15-17. [in Russian].

## Calculation of the linear coefficient of thermal expansion of multi-element, single-phase metal alloys from the first principles

A. Khachatrian \*

Frantzevich Institute for Problems of Materials Science NAS Ukraine, Kiev  
E-mail: [khachatrian.h.v@gmail.com](mailto:khachatrian.h.v@gmail.com)

*One of the possible ways to calculate the coefficient of thermal expansion is a method based on determining the dependence of the total energy of the electron-ion system on the parameters of the crystal lattice at different temperatures. There is a relationship between the calculated values of the linear coefficients of thermal expansion and the melting point of the material. For metals and multi-element single-phase alloys, the dependence of the function  $V = \alpha \cdot T_{max}$  on the parameter  $T/T_{max}$  ( $\alpha$  — the linear coefficients of thermal expansion,  $T_{max}$  — melting point of the material) is obtained from the first principles, which has the same form for all single-phase multi-element metal alloys and is presented analytically. Using the method of pseudopotential and quasiharmonic approximation, the linear coefficients of thermal expansion of multi-element metal alloys are calculated. The temperature dependence of the coefficient of thermal expansion, after approximating the results of the computational experiment, is presented in analytical form. The results were compared with known tabular data. To*



confirm the reliability of the model, the calculation was performed for a number of pure metals. The consistency of the calculated and experimental data on the coefficient of thermal expansion of single-phase alloys calculated from the first principles is observed. There is a relationship between the calculated values of the linear coefficients of thermal expansion and the melting point of the material. For metals and multi-element single-phase alloys, the dependence of the function  $V = \alpha \cdot T_{max}$  on the parameter  $T/T_{max}$  ( $\alpha$  — the linear coefficients of thermal expansion,  $T_{max}$  — melting point of the material) is obtained from the first principles, which has the same form for all single-phase multi-element metal alloys and is presented analytically.

**Keywords:** Electron-ion system energy, interatomic interaction potential, force constants, quasiharmonic approximation, coefficient of thermal expansion.