

# 金刚石/Ti 热压扩散过程的分子动力学模拟

王贵林, 于爱兵, 袁建东, 李克凡, 邹翩, 吴森凯

(宁波大学 机械工程与力学学院, 浙江 宁波 315211)

**摘要:** **目的** 应用分子动力学模拟金刚石与 Ti 在热压扩散过程中的界面原子扩散和 TiC 生成过程。**方法** 采用改进型嵌入原子势函数 (MEAM) 描述 Ti、C 和 Ti—C 之间的相互作用, 将模拟过程分为弛豫、热压和保温 3 个阶段, 模拟出金刚石与 Ti 界面间的原子扩散带厚度、原子扩散速度和 TiC 的成键过程。为了验证分子动力学模拟结果, 进行了聚晶金刚石与钛箔的热压扩散试验, 在聚晶金刚石表面制备了 Ti 涂层。利用扫描电子显微镜观察聚晶金刚石与 Ti 涂层之间的界面, 并进行 EDS 分析。利用 X 射线衍射仪分析聚晶金刚石与 Ti 界面的物相组成。**结果** 模拟结果显示, 在弛豫、热压和保温 3 个阶段, 金刚石与 Ti 之间的扩散带厚度分别为 0.870 9、0.888 9、2.056 5 nm, 从弛豫到热压阶段, 扩散带厚度增加了 2.07%, 从热压到保温阶段, 扩散带厚度增加了 131.35%; C 原子均方位移曲线斜率为  $1.877\ 4 \times 10^{-5}$ , Ti 原子的均方位移曲线斜率为  $1.016\ 7 \times 10^{-5}$ , C 原子的均方位移的斜率比 Ti 原子的均方位移的斜率快 84.66%; 在弛豫 20 ps 后, C 原子的游离键靠近 Ti 原子, 在 100 ps 的热压过程中, C 原子和 Ti 原子之间形成少量的 Ti—C 键, 在 500 ps 的保温过程中, 在界面间生成大量的 Ti—C 键。聚晶金刚石与 Ti 结合紧密、平整, 用 EDS 测试出聚晶金刚石与 Ti 界面间的扩散带厚度为 5.7  $\mu\text{m}$ , 在聚晶金刚石与 Ti 界面的 XRD 图谱测到了 TiC 衍射峰。**结论** 在金刚石与 Ti 的热压扩散过程中, C 和 Ti 原子之间存在明显的原子扩散现象, 形成了具有一定厚度的扩散带。在金刚石与 Ti 的界面区域的原子扩散中, C 原子的扩散能力和扩散速度大于 Ti 原子, 并在扩散界面内生成了 Ti—C 键, 金刚石与 Ti 之间形成了化学结合, 有助于提高金刚石表面与 Ti 涂层的结合强度。

**关键词:** 热压扩散; 分子动力学; 金刚石; Ti; 模拟

**中图分类号:** TG178 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3660(2022)08-0435-08

**DOI:** 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2022.08.040

## Molecular Dynamics Simulation of Hot Pressing Diffusion Process between Diamond/Ti Interface

WANG Gui-lin, YU Ai-bing, YUAN Jian-dong, LI Ke-fan, ZOU Pian, WU Sen-kai

(School of Mechanical Engineering and Mechanics, Ningbo University, Zhejiang Ningbo 315211, China)

**ABSTRACT:** The atomic diffusion and TiC formation process between diamond and Ti during hot pressing diffusion process

收稿日期: 2021-07-30; 修订日期: 2021-12-25

Received: 2021-07-30; Revised: 2021-12-25

基金项目: 国家自然科学基金 (51875294)

Fund: National Natural Science Foundation of China (51875294)

作者简介: 王贵林 (1996—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为表面工程。

Biography: WANG Gui-lin (1996-), Male, Postgraduate, Research focus: surface engineering.

通讯作者: 于爱兵 (1968—), 男, 博士, 教授, 主要研究方向为机械加工技术与表面工程

Corresponding author: YU Ai-bing (1968-), Male, Doctor, Professor, Research focus: machining technology and surface engineering.

引文格式: 王贵林, 于爱兵, 袁建东, 等. 金刚石/Ti 热压扩散过程的分子动力学模拟[J]. 表面技术, 2022, 51(8): 435-442.

WANG Gui-lin, YU Ai-bing, YUAN Jian-dong, et al. Molecular Dynamics Simulation of Hot Pressing Diffusion Process between Diamond/Ti Interface[J]. Surface Technology, 2022, 51(8): 435-442.

were simulated with molecular dynamics software. The potentials function of modified embedded atom method (MEAM) was used to describe the interactions between Ti, C and Ti—C. The simulation process was divided into three stages: relaxation, hot pressing and thermal insulation. The thicknesses of the atomic diffusion zone between diamond and Ti, as well as the diffusion speed of atoms and the bonding process of TiC were simulated. A hot pressing diffusion experiment of polycrystalline diamond and titanium foil was carried out to verify the results of molecular dynamics simulation. Ti coating was fabricated on surface of polycrystalline diamond with hot pressing diffusion method. A scanning electron microscope was used to observe the interface between polycrystalline diamond and Ti coating, and conducted an EDS analysis of the interface. An X-ray diffractometer was used to analyze the phase compositions of the interface between polycrystalline diamond and Ti. The simulation results show that in the three stages of relaxation, hot pressing and thermal insulation, the thickness of the diffusion zone between diamond and Ti is 0.870 9 nm, 0.888 9 nm and 2.056 5 nm, respectively. From the relaxation to the hot pressing stage, the thickness of the diffusion zone between diamond and Ti increases by 2.07%. From the hot pressing to the thermal insulation stage, the thickness of the diffusion zone between diamond and Ti increases by 131.35%. The slope of the mean square displacement curve of C atoms is  $1.877\ 4\times 10^{-5}$ , and the slope of the mean square displacement curve of Ti atoms is  $1.016\ 7\times 10^{-5}$ . The slope of the mean square displacement of C atoms is 84.66% faster than that the slope of the mean square displacement of Ti atoms. After a relaxation of 20 ps, the free bonds of C atoms near to Ti atoms. In the process of 100 ps hot pressing, a small amount of Ti—C bonds are formed between C atoms and Ti atoms. During the 500 ps thermal insulation process, a large number of Ti—C bonds are formed between the interface of diamond and Ti. The experimental results show that the interface morphology of polycrystalline diamond and titanium coating present a tight and smooth bonding state. The thickness of the diffusion zone between the polycrystalline diamond and Ti interface is 5.7  $\mu\text{m}$  measured by EDS method, and TiC diffraction peaks are detected in the XRD pattern of the interface between polycrystalline diamond and Ti. The research results show that there is obvious atomic diffusion phenomenon between C and Ti atoms, and diffusion zone with a certain thickness is formed during the hot pressing diffusion of diamond and Ti. During the hot pressing diffusion process of interface region between diamond and Ti, the diffusivity and diffusion rate of C atoms is faster than that those of Ti atoms, and a Ti—C bond is formed within the diffusion interface. A chemical combination between diamond and Ti coating is formed. It helps to improved the bonding strength between the diamond surface and the matrix material.

**KEY WORDS:** hot pressing diffusion; molecular dynamics; diamond; Ti; simulation

金刚石在半导体、集成电路以及模具等<sup>[1-4]</sup>的工程应用中,通常需要在金刚石表面镀覆一层金属,以提高金刚石的使用性能。例如,为了提高金刚石砂轮中金刚石磨粒与结合剂的结合强度,在金刚石磨粒表面镀覆 Ni 层,以减少金刚石磨粒的脱落,延长金刚石砂轮的使用寿命<sup>[5]</sup>。研究人员采用各种方法在金刚石表面制备金属涂层,并分析了金刚石涂层的表面、界面形貌以及界面反应。例如,Gu 等<sup>[6]</sup>采用微波加热法在金刚石颗粒表面制备 Ti 涂层,通过 SEM、XRD 和 EDX 测试发现,在金刚石颗粒表面形成均匀、连续的 Ti 涂层,在金刚石与 Ti 的界面间生成了 TiC。王元元等<sup>[7]</sup>采用化学气相沉积法在金刚石表面镀覆 W 涂层,试验测试表明,在金刚石表面得到了均匀致密的纳米级 W 涂层,但在界面间未生成 W 的碳化物。Chu 等<sup>[8]</sup>在金刚石表面蒸汽沉积 Cr 涂层并对涂层进行了火花等离子烧结,测试发现金刚石与 Cr 的界面间发生了原子扩散,生成了  $\text{Cr}_3\text{C}_2$ 。Ren 等<sup>[9]</sup>采用真空微沉积法在金刚石颗粒表面镀覆 Cr 涂层,在金刚石与 Cr 的界面之间测试到了  $\text{Cr}_7\text{C}_3$  成分。Dong 等<sup>[10]</sup>使用盐浴法在金刚石表面制备 W 涂层,测得涂层从外到内的物相结构依次为 W、 $\text{W}_2\text{C}$  和 WC。综上所述,

研究人员主要通过 EDS、EDX、XRD 和 SEM 等手段测试出界面间的原子扩散和化学反应,但是这些测试方法只能测出在金刚石表面形成了金属涂层的结果,很难直观反映出金刚石表面金属化过程中的原子扩散过程和化学反应过程。分子动力学通过对原子体系的运动方程进行时间积分来追踪原子的运动轨迹,可以用于模拟异种材料的扩散过程<sup>[11]</sup>。例如,应用分子动力学可以用来模拟金属表面制备涂层过程、金属涂层的拉伸试验和非晶合金与 TC4 钛合金的真空扩散连接等<sup>[12-14]</sup>,能够直观反映异种材料连接过程中的原子扩散区域、扩散速度和界面结合强度。本文应用分子动力学模拟方法,研究金刚石与 Ti 在热压扩散过程中的原子扩散过程和界面反应,并通过聚晶金刚石与钛箔的热压扩散试验,验证金刚石/Ti 热压扩散过程的分子动力学模拟结果。

## 1 分子动力学模拟方法

### 1.1 势能函数

分子动力学模拟选用改进型嵌入原子势 (MEAM),

MEAM 势函数普遍用于描述金属多体势和金属原子间相互扩散, MEAM 势函数的表达式为<sup>[15]</sup>:

$$E=\sum_i\left\{F_i(\bar{\rho}_i)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\phi_{ij}(R_{ij})\right\}$$

(1)

$$F_i(\bar{\rho}_i)=A_iE_i^0\bar{\rho}_i\ln\bar{\rho}_i$$

(2)

式中:  $E$  为原子系统的总能量由相互作用对势能和原子嵌入能组成;  $\bar{\rho}_i$  为  $i$  原子的电子云密度;  $F_i$  为嵌入电子云的能量函数;  $\phi_{ij}(R_{ij})$  为原子  $i$ 、 $j$  之间的距离为  $R_{ij}$  时的对势;  $E_i^0$  为原子  $i$  的结合能;  $A_i$  为结构参数。

MEAM 势函数能够较好地描述 C、Ti 和 Ti—C 之间的相互作用, 它们之间的 MEAM 势函数相关参数见表 1 和表 2<sup>[16]</sup>。表中  $E_c$  为结合能,  $r_c$  为最近邻距离,  $B$  为体积模量。

1.2 原子扩散模型

金刚石与 Ti 的原子扩散模型分别由金刚石晶体和 Ti 晶体构建, 其中, 金刚石晶体模型的尺寸为 7.050 75 nm×1.695 75 nm×7.854 nm, Ti 晶体模型的尺寸为 7.082 64 nm×1.703 82 nm×7.710 59 nm。金刚石的晶格类型为立方晶格, 晶格常数为  $a=b=c=0.357$  nm; Ti 的晶格类型为密排六方晶格 (hcp), 晶格常数为  $a=b=0.468$  3 nm、 $c=0.295$  11 nm<sup>[17-18]</sup>。在模型建立过程中, 金刚石和 Ti 晶体之间的间隙尺寸为 0.341 21 nm, 其中, C 原子 17 800 个, Ti 原子 5 676 个。为了避免尺度效应和模拟时丢失过多原子, 在  $x$ 、 $y$ 、 $z$  方向上均设定周期性边界条件, 并分别将 Ti 原子层上方及 C 原子层下方的 6 层原子设置为刚体, 建立的模型如图 1 所示。

表 1 C 与 Ti 的 MEAM 势参数  
Tab.1 MEAM potential parameters of C and Ti

Element	$E_c/\text{eV}$	$r_c/\text{nm}$	$B/$ ( $10^{12}$ dyne·cm $^{-2}$ )	The reference structures											
				$A$	$\beta_0$	$\beta_1$	$\beta_2$	$\beta_3$	$t_0$	$t_1$	$t_2$	$t_3$	$C_{\min}$	$C_{\max}$	$d$
C	7.37	0.154	4.45	1.18	4.25	2.8	2	5	1	3.2	1.44	-4.48	1.41	2.8	0
Ti	4.87	0.292	1.1	0.66	2.7	1	3	1	1	6.8	-2	-12	1	1.44	0

表 2 Ti—C 的 MEAM 势参数  
Tab.2 MEAM potential parameters of Ti—C

$E_c/\text{eV}$	$r_c/\text{nm}$	$B/$ ( $10^{12}$ dyne·cm $^{-2}$ )	The reference structures							
			$C_{\min}(121)$	$C_{\min}(212)$	$C_{\min}(112)$	$C_{\min}(122)$	$C_{\max}(121)$	$C_{\max}(212)$	$C_{\max}(112)$	$C_{\max}(122)$
5.34	0.221	2.419	0.64	0.64	2.064	2.064	1.44	2.8	2.8	2.8

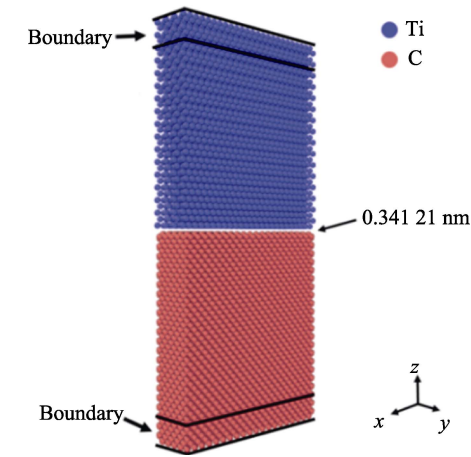


图 1 金刚石与 Ti 的原子扩散模型  
Fig.1 Atomic diffusion model of diamond and Ti

使用 LAMMPS 软件对金刚石与 Ti 的原子扩散过程进行分子动力学模拟。将系统设定为正则系综, 模拟步长为 0.001 ps, 原子初始速度状态由麦克斯韦速率分布随机赋予, 采用 Nose-Hoover 控温法进行等温控制。在分子动力学模拟过程中, 通过验证性模拟得

出弛豫过程的温度为 293 K, 时间为 20 ps, 即图 2 中的 I 阶段; 弛豫后, 以 6.6 K/ps 的升温速率到达设定的模拟温度  $T=953$  K, 热压阶段系统运行 100 ps, 即图 2 中的 II 阶段; 随后保温 500 ps, 如图 2 中的 III 阶段所示。原子信息的记录间隔为 1 ps, 输出原子扩散带厚度、扩散位移和 TiC 成键过程。

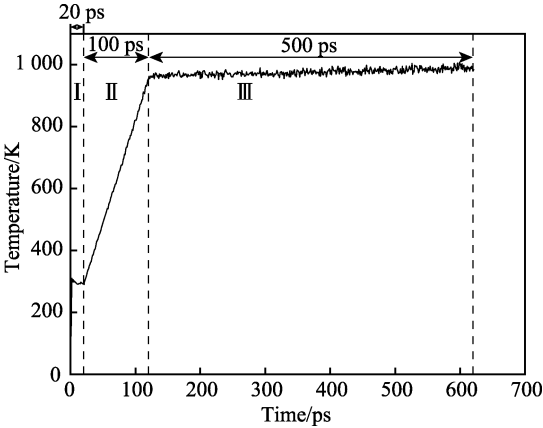


图 2 热压扩散温度曲线  
Fig.2 Temperature curve of hot pressing diffusion

## 2 试验

### 2.1 材料

选用纯度为 99.87% 的钛箔, 尺寸为  $7\text{ mm} \times 7\text{ mm} \times 0.02\text{ mm}$ , 聚晶金刚石 (Polycrystalline Diamond, PCD) 复合片的直径为  $\phi 5\text{ mm}$ , 厚度为  $1.6\text{ mm}$ 。

### 2.2 方法

将钛箔放置在质量分数为 10% 的 NaOH 溶液中煮沸 10 min 进行去油处理, 再用去离子水冲洗钛箔 3 min 并烘干, 将钛箔放入鼓风干燥箱进行干燥处理, 温度为  $80\text{ }^{\circ}\text{C}$ , 干燥时间为 30 min。采用粒度为 2500 $\mu\text{m}$  的 SiC 砂纸轻微打磨聚晶金刚石表面以去除表面杂质, 将打磨好的聚晶金刚石放入丙酮溶液中超声波清洗 10 min, 并烘干处理。

如图 3 所示, 在 AlN 陶瓷垫片之间放入处理后的钛箔和聚晶金刚石试样并安装在两压板中间。根据前期预试验确定出聚晶金刚石表面制备 Ti 涂层热压扩散的压力为 15 MPa, 温度为 953 K, 保温时间为 2 h。使用液压机对压板施加压力至 15 MPa 后用螺栓紧固压板, 以保持压力。将装夹装置加压后的试样放入高真空热处理炉进行热处理。当炉内真空度达到  $9.3 \times 10^{-3}\text{ Pa}$  后, 以 10 K/min 的速率进行升温, 使炉

内温度达到扩散温度 953 K 后保温 2 h, 取出试样。

### 2.3 涂层表征

使用 XQ-2B 型镶嵌机制备试样的表面和截面。使用 SU5000 型扫描电子显微镜观察试样的表面和界面形貌, 并分析试样的界面元素。采用 D8 DISCOVER 型 X 射线衍射仪进行物相分析。

## 3 结果与讨论

### 3.1 扩散带

3 个阶段的金刚石与 Ti 的界面原子扩散过程模拟结果如图 4 所示。以能量最小化状态作为 0 ps 时刻, 此时, 各原子在晶格节点上振动, 原子位置未产生明显变化。从 20 ps 的系统弛豫到 500 ps 的保温阶段, C 原子与 Ti 原子之间的扩散程度逐渐加剧, 界面附近的 C 和 Ti 原子发生相互迁移, 并在扩散界面间形成了一定厚度的扩散带。

将图 4b—d 以 0.3 nm 为单位切片, 计算每一切片内 C 原子和 Ti 原子的原子数量比, 便可以得到界面间原子数量的比例变化。图 5 分别为 3 个阶段金刚石与 Ti 层界面之间的原子数量比例。一般认为, 当扩散原子数量比例超过 5% 时, 便形成了扩散区域<sup>[19]</sup>, 图 5 中的水平虚线 A 为原子数量比例为 5% 的界线, 两条垂直虚线围成的区域为金刚石与 Ti 层的扩散带。可以计算出弛豫、热压和保温阶段, 界面间的扩散带厚度分别为 0.870 9、0.888 9、2.056 5 nm。从弛豫到热压阶段, 扩散带厚度增加了 2.07%; 从热压到保温阶段, 扩散带厚度增加了 131.35%。

为了验证金刚石与 Ti 界面间是否形成了扩散带, 采用真空热压扩散法制备聚晶金刚石与 Ti 涂层试样。图 6 为聚晶金刚石与 Ti 涂层的界面形貌, 可以观察到聚晶金刚石与 Ti 涂层结合紧密、平整。

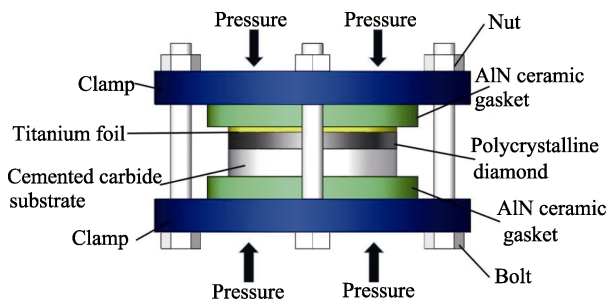


图 3 试样装夹装置示意图

Fig.3 Schematic diagram of specimen clamping setup

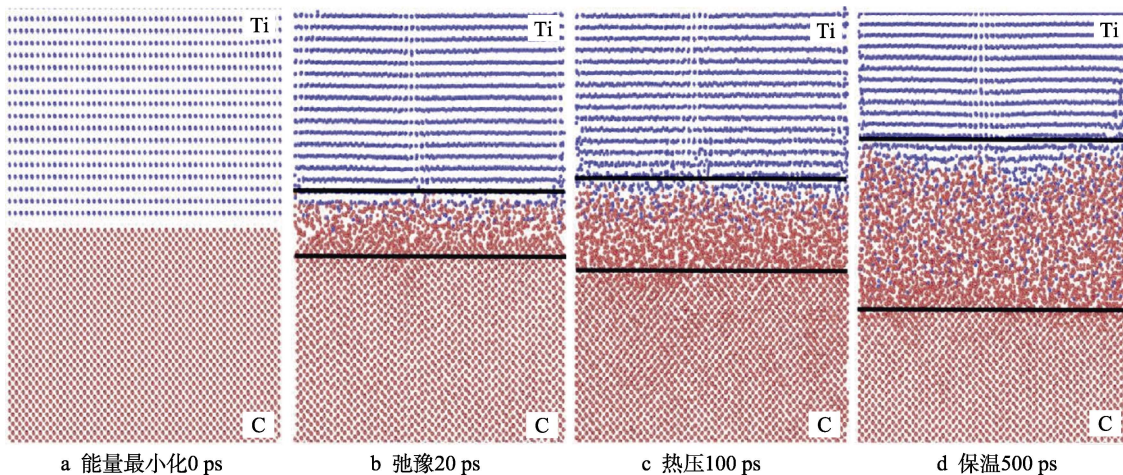


图 4 界面原子扩散过程模拟结果

Fig.4 Simulation results of interface atomic diffusion process: a) energy minimization 0 ps; b) relaxation 20 ps; c) hot pressing 100 ps; d) insulation 500 ps



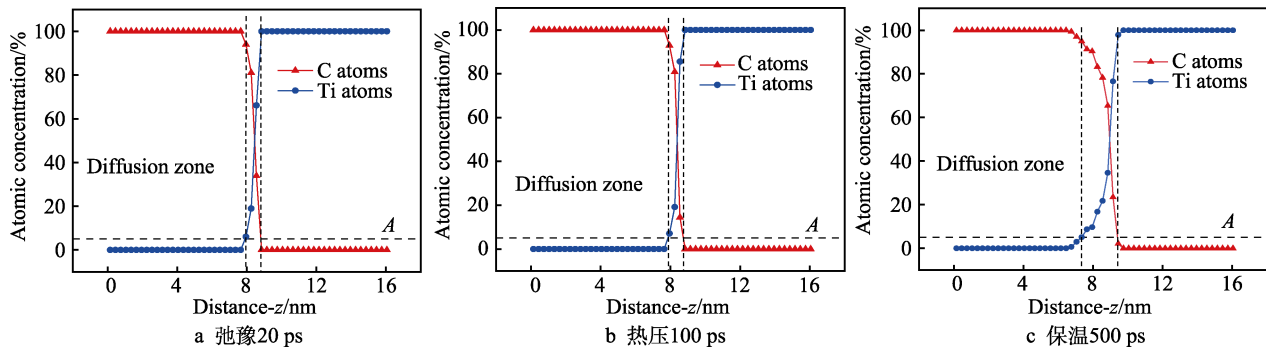


图 5 界面原子数量比例变化情况

Fig.5 Change of interface atoms number ratio: a) relaxation 20 ps; b) hot pressing 100 ps; c) insulation 500 ps

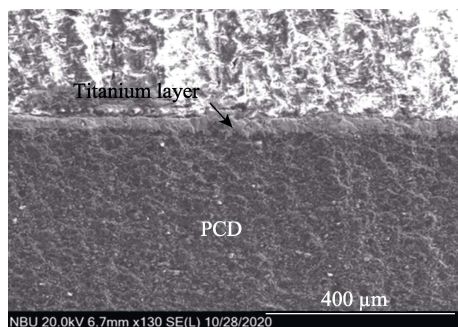


图 6 聚晶金刚石与 Ti 的界面形貌  
Fig.6 Interface morphology of polycrystalline diamond and Ti

聚晶金刚石与 Ti 涂层界面的 EDS 分析结果如图 7 所示, 聚晶金刚石与 Ti 之间存在明显的元素扩散现象, 界面间的扩散带厚度为 5.7  $\mu\text{m}$ 。上述试验结果显示, 通过热压扩散试验, 在聚晶金刚石和 Ti 的结合界面处, C 和 Ti 原子之间存在明显的原子扩散现象, 且形成了具有一定厚度的扩散带。上述试验结果验证了图 4 模拟结果。

### 3.2 扩散位移

在原子扩散过程中, 单位时间内的原子位移可以反映出原子的扩散能力。对比 C 原子和 Ti 原子在 0 ps、

弛豫 20 ps、热压 100 ps 和保温 500 ps 时的位移变化情况, 得到如图 8 所示的原子的位移矢量图。可以观察到, 在开始阶段 0 ps 时, 各原子在晶格节点上振动, 原子很少产生迁移。图 9a 为图 8a 中 B 处原子矢量位移局部放大, 其中, 箭头的长度、方向表示原子移动的距离和方向。系统弛豫 20 ps 后, 在金刚石与 Ti 的界面间可以观察到少量 C 原子和 Ti 原子的箭头, 且箭头具有一定长度, 表明出现了轻微的原子扩散现象。在热压 100 ps 后, 如图 8c 所示, 金刚石与 Ti 层界面间迁移的 Ti 原子和 C 原子数量增多, 表明金刚石与 Ti 层的界面间发生了明显的扩散现象。在保温 500 ps 后, 图 9b 为图 8d 中 C 处原子矢量位移局部放大, 金刚石与 Ti 层的界面间原子迁移更加剧烈, 其中红色的 C 原子的箭头数量和长度多于蓝色的 Ti 原子, 表明 C 原子的扩散能力大于 Ti 原子的扩散能力。

为了进一步探究扩散过程中的原子运动情况, 计算 C 和 Ti 的原子均方位移 (Mean Square Displacement, MSD)。当均方位移不随时间而增大时, 原子呈振动状态; 当均方位移随着时间增大时, 原子做扩散运动<sup>[20]</sup>。由于主要探究原子在 Z 方向上的扩散情况, 因此, 仅计算原子在 Z 方向上的均方位移。通过 LAMMPS 软件模拟得到 C 原子与 Ti 原子的均方位移曲线, 如图 10

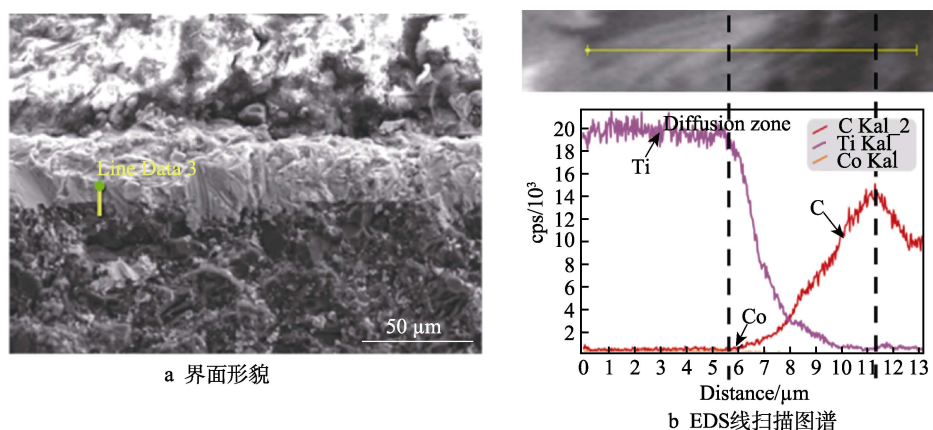


图 7 聚晶金刚石与 Ti 界面的 EDS 线扫描结果

Fig.7 EDS line scan results of the interface between polycrystalline diamond and Ti:  
a) interface morphology; b) b EDS line scan map

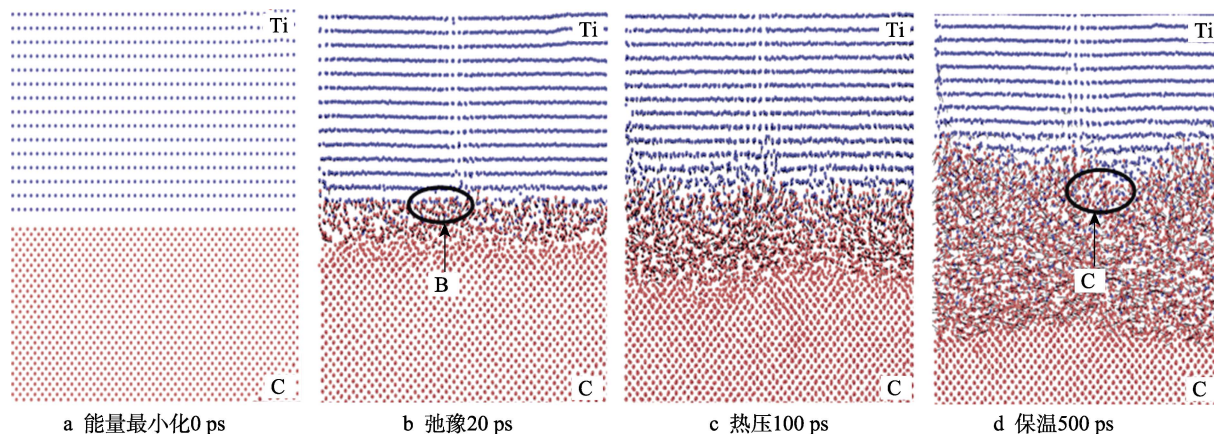


图8 原子位移矢量

Fig.8 Atomic displacement vector: a) energy minimization 0 ps; b) relaxation 20 ps; c) hot pressing 100 ps; d) insulation 500 ps

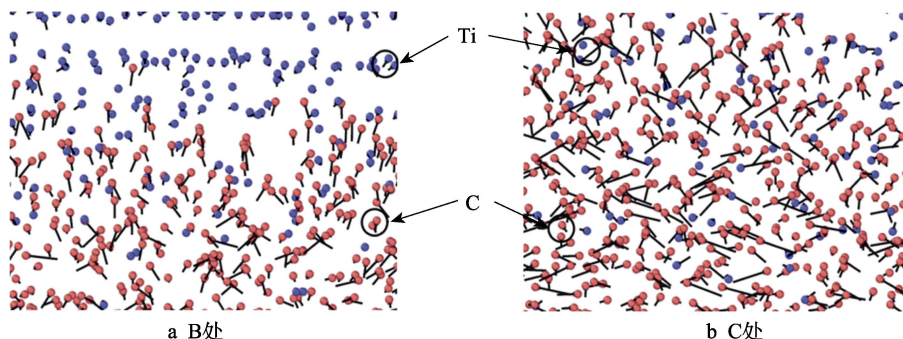


图9 图8中原子位移矢量的局部放大

Fig.9 Local magnification of the atomic displacement vector in fig.8

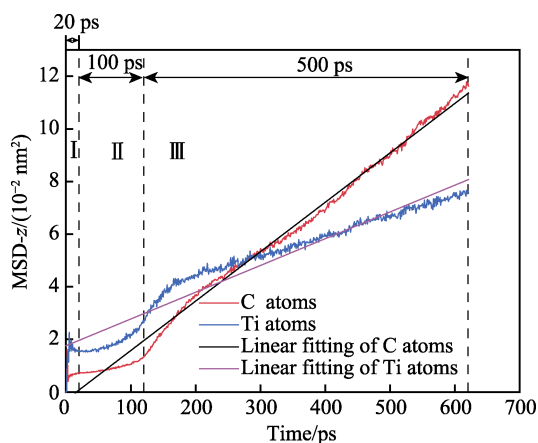


图10 C和Ti原子的均方位移曲线

Fig.10 Curves of mean square displacement of C and Ti atoms

所示。将均方位移分为Ⅰ、Ⅱ、Ⅲ3个阶段，分别对应弛豫、热压和保温阶段。

在Ⅰ、Ⅱ阶段，Ti原子的均方位移曲线高于C原子的均方位移曲线，这是因为金属Ti的键能小于金刚石的键能<sup>[21]</sup>，所以在受热状态下Ti的金属键比金刚石的共价键更容易断裂，形成游离Ti原子。游离的原子随着温度的增加运动更加激烈，从而导致出现此现象。在第Ⅲ阶段，C原子的均方位移曲线逐渐

超过Ti原子的均方位移曲线，这是由于C原子的半径小于Ti原子的半径，且C原子尺寸远远小于Ti的晶格间距<sup>[22]</sup>，小半径的C原子更容易向Ti原子的间隙中扩散。Zhang等<sup>[23]</sup>通过熔盐法在金刚石表面制备Ti层，结果显示，小半径的C原子更容易向Ti原子的间隙扩散。对C原子和Ti原子均方位移曲线进行线性拟合，结果如图10中2条直线所示，C原子的均方位移曲线斜率为 $1.8774 \times 10^{-5}$ ，Ti原子的均方位移曲线斜率为 $1.0167 \times 10^{-5}$ ，对比2个原子的均方位移曲线斜率数值可知，C原子比Ti原子快84.66%，说明C原子的扩散速度大于Ti原子。

### 3.3 界面反应

图11为扩散过程中的TiC成键过程。在弛豫20 ps时，C的游离键向Ti靠近，但没有发生化学反应，如图11a所示。在100 ps的热压过程中，C原子和Ti原子之间形成少量的Ti—C键，如图11b中箭头D所示。在图11c所示的保温500 ps阶段，在界面间生成大量的Ti—C键，说明在金刚石和Ti的界面间发生了化学反应，生成了TiC。

为了验证图11中的模拟结果，用SiC砂纸打磨聚晶金刚石/Ti涂层试样表面，以去除试样表面的Ti涂层露出聚晶金刚石与Ti之间的界面，在丙酮溶液



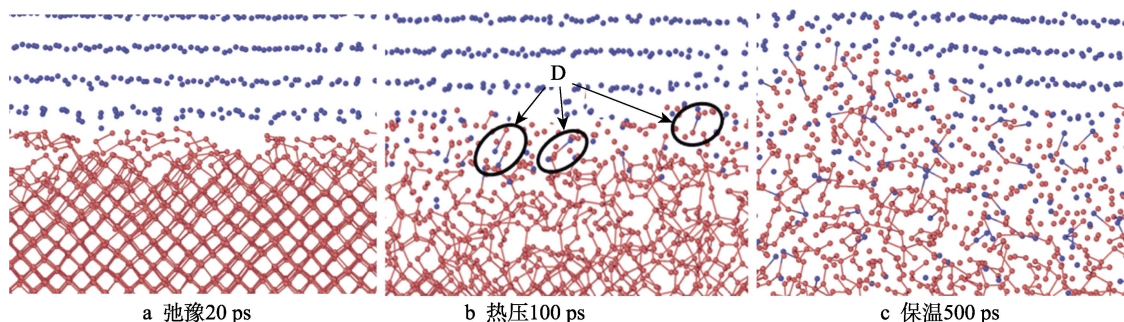


图 11 原子扩散过程中 TiC 的成键

Fig.11 Bonding of TiC during atomic diffusion process: a) relaxation 20 ps; b) hot pressing 100 ps; c) insulation 500 ps

中超声清洗并烘干, 试样表面形貌如图 12 所示, 在聚晶金刚石表面可观察到灰白色点状颗粒, 如箭头 E 处所示。对图 12 所示区域进行 XRD 物相分析, 结果如图 13 所示。除了检测到聚晶金刚石、WC、Ti 的衍射峰外, 还在  $2\theta=35.906^\circ$ 、 $41.71^\circ$ 、 $60.448^\circ$ 、 $72.369^\circ$ 、 $76.139^\circ$  处, 分别检测到 TiC 的 (111)、(200)、(220)、(311)、(222) 衍射峰, 说明在聚晶金刚石与 Ti 界面处生成了 TiC, 实现了聚晶金刚石与 Ti 涂层的化学结合。

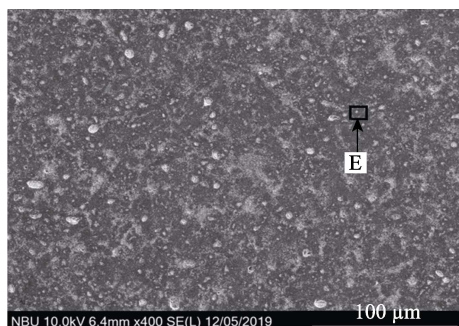


图 12 聚晶金刚石与 Ti 的界面形貌  
Fig.12 Interface morphology of polycrystalline diamond and Ti

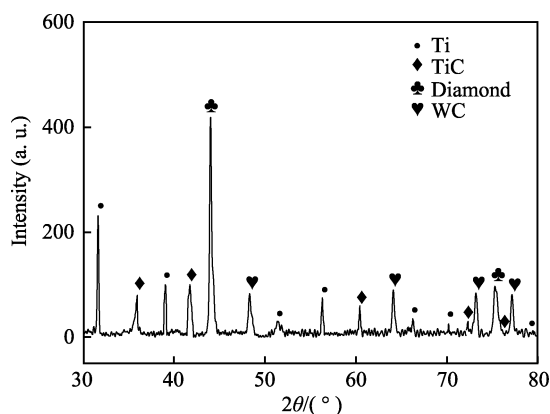


图 13 聚晶金刚石与 Ti 界面的 XRD 图谱  
Fig.13 XRD pattern of the interface between polycrystalline diamond and Ti

## 4 结论

1) 分子动力学模拟结果显示, 在金刚石与 Ti 的热压扩散过程中, 在金刚石和 Ti 的结合界面处, C

和 Ti 原子之间存在明显的扩散现象, 形成了具有一定厚度的扩散带, 试验测试结果显示, 聚晶金刚石与 Ti 界面间的扩散带厚度为  $5.7 \mu\text{m}$ 。

2) 在金刚石与 Ti 界面区域的原子扩散模拟结果显示, C 原子和 Ti 原子之间发生了互相迁移, C 原子的扩散能力和扩散速度均大于 Ti 原子。

3) 分子动力学模拟结果显示, 在金刚石与 Ti 的热压扩散过程中, 在扩散界面内生成了 Ti—C 键, 金刚石与 Ti 之间发生了化学反应。在聚晶金刚石与 Ti 的界面通过 XRD 检测到了 TiC 的衍射峰, 实现了聚晶金刚石与 Ti 的化学结合。

## 参考文献:

- [1] 邓佳丽, 张洪迪, 范同祥, 等. 电子封装用金刚石/铜复合材料界面与导热模型的研究进展[J]. 材料导报, 2016, 30(3): 19-28.  
DENG Jia-li, ZHANG Hong-di, FAN Tong-xiang, et al. Recent Progress on Interface and Thermal Conduction Models of Diamond/Copper Composites Used as Electronic Packaging Materials[J]. Materials Review, 2016, 30(3): 19-28.
- [2] MINGHE C, HONGZHAO L, CHANGRUI W. Progress in Heat Conduction of Diamond/Cu Composites with High Thermal Conductivity[J]. Rare Metal Materials, 2020, 23: 596.
- [3] 刘园, 崔岩, 郭开金, 等. 高导热金刚石/铝复合材料的研究进展[J]. 材料工程, 2020, 48(12): 44-52.  
LIU Yuan, CUI Yan, GUO Kai-jin, et al. Research Progress in High Thermal Conductivity Diamond/Aluminum Composites[J]. Journal of Materials Engineering, 2020, 48(12): 44-52.
- [4] 安俊杰, 魏秋平, 叶文涛, 等. 泡沫铜表面改性对化学气相沉积高质量泡沫金刚石的表面影响[J]. 表面技术, 2020, 49(3): 97-105.  
AN Jun-jie, WEI Qiu-ping, YE Wen-tao, et al. High Quality Diamond Films Deposited on Surface Modified Cu Foams by Chemical Vapor Deposition Method[J]. Surface Technology, 2020, 49(3): 97-105.
- [5] ZUO Zong-shi, HU Bo-nian, CHEN Hong, et al. Effect of

- Activators on the Properties of Nickel Coated Diamond Composite Powders[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2017, 33(11): 1409-1415.
- [6] GU Quan-chao, PENG Jing-hui, XU Lei, et al. Preparation of Ti-Coated Diamond Particles by Microwave Heating[J]. *Applied Surface Science*, 2016, 390: 909-916.
- [7] 王元元, 马捷, 李辉, 等. 金刚石粉体表面CVD法镀钨的工艺研究[J]. *表面技术*, 2017, 46(2): 98-102.
- WANG Yuan-yuan, MA Jie, LI Hui, et al. Technical Study of Tungsten Plating on Surface of Diamond Powder by CVD[J]. *Surface Technology*, 2017, 46(2): 98-102.
- [8] CHU Ke, LIU Zhao-fang, JIA Cheng-chang, et al. Thermal Conductivity of SPS Consolidated Cu/Diamond Composites with Cr-Coated Diamond Particles[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2010, 490(1-2): 453-458.
- [9] REN Shu-bin, SHEN Xiao-yu, GUO Cai-yu, et al. Effect of Coating on the Microstructure and Thermal Conductivities of Diamond-Cu Composites Prepared by Powder Metallurgy[J]. *Composites Science and Technology*, 2011, 71(13): 1550-1555.
- [10] DONG Ying-hu, ZHANG Rui-qing, ZHOU Lang, et al. Formation Mechanism and Properties of Thickness-Controllable Tungsten Coating on Diamond Surface by Salt Bath Plating[J]. *Materials Science Forum*, 2018, 933: 264-273.
- [11] 钱相飞, 郭巧能, 杨仕娥, 等. Cu/Al 浇铸界面连接及拉伸性能的分子动力学模拟[J]. *中国有色金属学报*, 2020, 30(12): 2886-2900.
- QIAN Xiang-fei, GUO Qiao-neng, YANG Shi-e, et al. Molecular Dynamics Simulation of Interface Bonding and Tensile Properties of Cu/Al Casting[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2020, 30(12): 2886-2900.
- [12] 高健. 纯镁表面扩散铝涂层的制备及分子动力学研究[D]. 济南: 山东大学, 2010.
- GAO Jian. Aluminium-Based Protecting Coatings on Magnesium: Fabrication, Microstructures, and Molecular Dynamics[D]. Jinan: Shandong University, 2010.
- [13] WANG Xue, XIAO Wei, WANG Jian-wei, et al. Enhanced Interfacial Strength of Graphene Reinforced Aluminum Composites via X(Cu,Ni,Ti)-Coating: Molecular-Dynamics Insights[J]. *Advanced Powder Technology*, 2021, 32(7): 2585-2590.
- [14] 张秋光. TC4钛合金的质子辐照效应及其低温扩散连接机制[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2020.
- ZHANG Qiu-guang. Proton Irradiation Effect and Diffusion Bonding Mechanism of TC4 Titanium Alloy at Low Temperature[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2020.
- [15] BASKES M I. Modified Embedded-Atom Potentials for Cubic Materials and Impurities[J]. *Physical Review B, Condensed Matter*, 1992, 46(5): 2727-2742.
- [16] KIM Y M, LEE B J. Modified Embedded-Atom Method Interatomic Potentials for the Ti-C and Ti-N Binary Systems[J]. *Acta Materialia*, 2008, 56(14): 3481-3489.
- [17] 孙照龙. 金刚石和氮化硼表面重构及功能化的结构和性质的理论研究[D]. 长春: 吉林大学, 2020.
- SUN Zhao-long. Theoretical Studies on the Structures and Properties of Surface Reconstruction and Functionalization of Diamond and Boron Nitride[D]. Changchun: Jilin University, 2020.
- [18] ZHU Y, FAN H, ZHANG Y C. The Research of Titanium Nano-Vibration Cutting Based on Molecular Dynamics[J]. *Machine Tool & Hydraulics*, 2017, 45(06): 62-68.
- [19] 刘小刚, 张顺, 李百洋, 等. TC4 时效相变及扩散连接的分子动力学模拟[J]. *稀有金属材料与工程*, 2018, 47(10): 3045-3051.
- LIU Xiao-gang, ZHANG Shun, LI Bai-yang, et al. Molecular Dynamics Simulation of TC4 Aging Phase Transition and Diffusion Bonding[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2018, 47(10): 3045-3051.
- [20] 朱逸颖. 基于分子动力学的 CuZr 非晶合金成形与连接研究[D]. 武汉: 华中科技大学, 2016.
- ZHU Yi-ying. Investigation on Forming and Bonding CuZr Metallic Glasses via Molecular Dynamic Simulation[D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2016.
- [21] 刘林, 傅恒志. Ni 基高温合金中 MC 碳化物的 Raman 光谱及键能计算[J]. *材料科学进展*, 1989, 3(5): 460-462.
- LIU Lin, FU Heng-zhi. Raman Spectra and Calculation of Bond Energy of MC Carbides in Ni-Base Superalloy[J]. *Chinese Journal of Materials Research*, 1989, 3(5): 460-462.
- [22] 丁大伟, 陈燕, 傅玉灿. 含硼金刚石钎焊界面分析及磨粒强度研究[J]. *金刚石与磨料磨具工程*, 2015, 35(5): 9-14.
- DING Da-wei, CHEN Yan, FU Yu-can. Investigation of Grain Strength and Interfacial Microstructure in the Brazed Joint of Boron-Doped Diamond[J]. *Diamond & Abrasives Engineering*, 2015, 35(5): 9-14.
- [23] ZHANG Y, ZHANG H L, WU J H, et al. Enhanced Thermal Conductivity in Copper Matrix Composites Reinforced with Titanium-Coated Diamond Particles[J]. *Scripta Materialia*, 2011, 65(12): 1097-1100.

责任编辑: 万长清