

温度对金刚石涂层膜基界面力学性能的影响

简小刚 张允华

The effect of temperature on the mechanical properties of the diamond coating at the film-substrate interface

Jian Xiao-Gang Zhang Yun-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 046701 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.046701

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.046701>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I4>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

$U_{1-x}Pu_xO_2$ 热膨胀性质分子动力学模拟研究

Molecular dynamic study on thermal expansion of $U_{1-x}Pu_xO_2$

物理学报.2014, 63(8): 083103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.083103>

Al_n (n=13--32) 团簇熔化行为的分子动力学模拟研究

Molecular dynamical simulations of the melting properties of Al_n (n=13--32) clusters

物理学报.2013, 62(19): 193104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.193104>

UO_2 晶体中低密勒指数晶面表面能的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of surface energy of low miller index surfaces in UO_2

物理学报.2013, 62(10): 103104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.103104>

$Li+HF(v=0-3, j=0) \rightarrow LiF+H$ 反应的立体动力学理论研究

Stereodynamics study of $Li+HF(v=0-3, j=0) \rightarrow LiF+H$ reaction

物理学报.2013, 62(7): 073105 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.073105>

金纳米管力学性能的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation on mechanical properties of gold nanotubes

物理学报.2013, 62(6): 063103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.063103>

温度对金刚石涂层膜基界面力学性能的影响*

简小刚[†] 张允华

(同济大学机械与能源工程学院, 上海 201804)

(2014年7月7日收到; 2014年9月17日收到修改稿)

利用分子动力学方法建立了硬质合金基底金刚石涂层膜基界面模型, 并采用 Morse 势函数和 Tersoff 势函数相互耦合的方法来表征模型内原子间的相互作用关系, 在此基础上对不同温度 (0—800 K) 条件下硬质合金基底金刚石涂层膜基界面的力学性能进行了分子动力学仿真计算. 结果表明: 当温度由 0 K 上升到 800 K 的过程中, 金刚石涂层膜基界面拉伸强度呈下降趋势, 并且在 0—300 K 范围内下降趋势明显, 在 300—800 K 范围内下降趋势缓和; 体系能量随温度的变化具有相同的下降趋势.

关键词: 金刚石涂层, 膜基界面, 分子动力学, 膜基结合强度

PACS: 67.30.hp, 67.30.hr, 31.15.xv, 68.35.Gy

DOI: 10.7498/aps.64.046701

1 引言

随着汽车、电子、航空航天产业的飞速发展, 新型材料的应用愈加广泛, 这些材料普遍具有硬度大、强度高的特点, 而以高速钢和硬质合金材料为主的传统刀具已无法满足对其高精度、高效率的加工要求, 因此, 急需开发一种耐磨性好、加工精度高、使用寿命长的新型刀具. 而金刚石凭借其高硬度、高热导率、低摩擦系数以及低热膨胀系数等优异性能, 被认为是最理想的刀具材料之一^[1-3]. 利用化学气相沉积 (chemical vapor deposition, CVD) 方法在硬质合金基底上沉积一层金刚石薄膜而制备的金刚石涂层刀具可以达到提高刀具切削性能、延长使用寿命的效果. 然而, 一直以来, 诸多因素导致的金刚石涂层膜基界面结合强度偏低影响了金刚石涂层刀具的规模化生产及应用^[4]. 其中, 温度对金刚石涂层膜基界面结合强度的影响尤为关键, 因此, 对其作用机理和影响规律的深入研究可以为改善金刚石涂层膜基界面力学性能提供理论支持. 而现有研究方法诸如压痕法、垂直拉伸法、鼓泡法和刮剥式测量法等普遍具有实

验周期长、实验条件难以保证以及测量精度不高等缺点, 难以满足对金刚石涂层膜基界面力学性能的温度效应研究^[5,6]. 为了弥补宏观研究方法的不足, 本文尝试从微观角度出发, 基于分子动力学理论, 借助计算机模拟手段来研究温度对硬质合金基底金刚石涂层膜基界面力学性能的影响. 模拟过程中, 借助 Morse 势函数和 Tersoff 势函数来表征原子间的相互作用, 采用拉伸法对不同温度 (0—800 K) 条件下金刚石涂层膜基界面力学性能进行了仿真计算, 并从能量的角度分析了温度对金刚石涂层膜基界面力学性能的影响.

2 几何建模及模拟方法

2.1 几何模型

金刚石涂层刀具是利用 CVD 法在硬质合金基底上沉积一层金刚石薄膜而制备的, 如图 1 所示, 其中, 硬质合金基底是通过黏结相将 WC 颗粒黏附形成的. 本文采用分子动力学软件 MS (materials studio) 建立硬质合金基底金刚石涂层膜基界面三维模型, 具体建模流程如图 2 所示. WC 和金刚石

* 国家自然科学基金 (批准号: 50605047, 51275358) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: jianxg@tongji.edu.cn

的单晶胞如图3(a)和(b)所示, 其晶格类型及参数见表1.

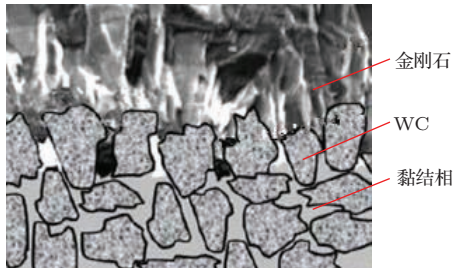


图1 金刚石涂层膜基界面模型

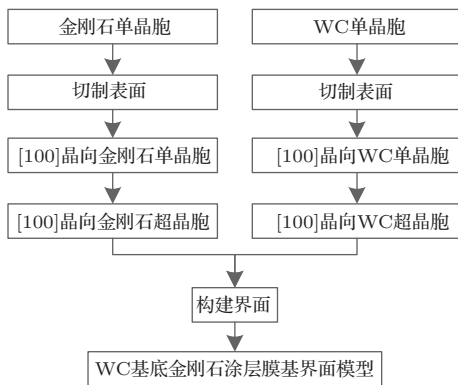


图2 金刚石涂层膜基界面建模流程

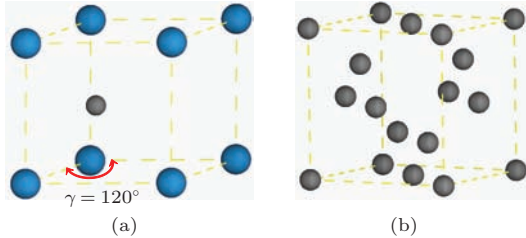


图3 WC和金刚石单晶胞模型 (a) WC; (b) 金刚石

表1 金刚石和WC晶格参数

| 材料 | 晶格常数 | 晶格类型 |
|-----|----------------------------------------------------|--------|
| 金刚石 | $a = b = c = 3.567 \text{ \AA}$ | 面心立方晶格 |
| WC | $a = b = 2.900 \text{ \AA}, c = 2.831 \text{ \AA}$ | 简单六角晶格 |

依据图2所示的建模流程, 建立WC基底金刚石涂层膜基界面的分子动力学模型, 如图4所示. 基底为WC, 其沿X, Y, Z方向的尺寸为 $36 \text{ \AA} \times 36 \text{ \AA} \times 80 \text{ \AA}$; 涂层为沿[100]晶向沉积的金刚石薄膜, 其沿X, Y, Z方向的尺寸为 $36 \text{ \AA} \times 36 \text{ \AA} \times 40 \text{ \AA}$; 体系原子个数为18036个, 其中WC基底原子个数为9217个, 金刚石涂层原子个数为8819个. 图5为界面处WC基底与金刚石涂层的原子排列.

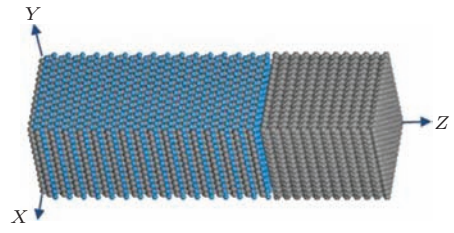


图4 WC基底金刚石涂层膜基界面模型

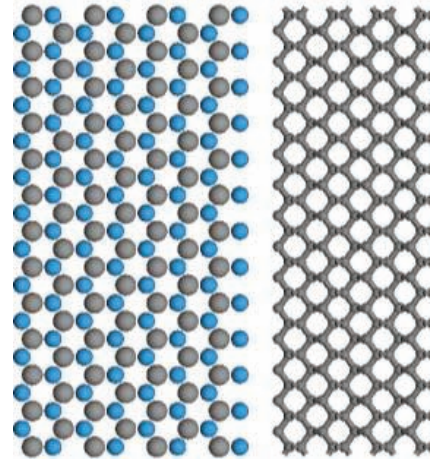


图5 膜基界面原子排列

2.2 模拟方法

分子动力学模拟在微纳米尺度下研究材料性能、预测材料特性方面具有明显的优势. 分子动力学模拟中, 纳米尺度下的原子运动依然遵循牛顿运动方程^[7-9]. 对于一个由N个粒子构成的独立体系, 粒子的运动方程为

$$a_i = \frac{d^2 r_i}{dt^2} = \frac{F_i + f_i}{m_i}, \quad (1)$$

$$F_i = -\nabla_i U, \quad (2)$$

式中, m_i 和 r_i 分别为第*i*个原子的质量和位置矢量; F_i 和 f_i 分别为原子间相互作用力和其他作用力; U 为体系的势函数.

分子动力学模拟的关键在于势函数的选用, 因硬质合金基底金刚石涂层膜基界面的作用机理非常复杂, 单一势函数很难对原子间相互作用进行精确表征^[10]. 因此, 本文采用Tersoff势函数和Morse势函数相互耦合的方法来表征WC基底金刚石涂层膜基界面原子间的相互作用. 其中, Tersoff势函数为三体势, 适用于描述以共价键结合的原子间的相互作用, 尤其在表征碳、硅晶体原子间相互作用

方面具有明显优势^[11], 其具体表达式为

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \quad (3)$$

$$V_{ij} = f_C(r_{ij})(f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})), \quad (4)$$

式中, E 为体系的总能量; V_{ij} 为 i, j 原子间的成键能量; f_A 和 f_R 分别为对势的吸引项和排斥项; f_C 为光滑截断函数; b_{ij} 为吸引势函数.

Morse 势函数为二体势, 其给出的模型具有较好的稳定性, 模型的定义也比较精确, 能够很好地表征 WC 体系原子以及界面原子间的相互作用^[12], 该模型的具体表达式为

$$U = D_{ij} \exp(-2\beta(r_{ij} - r_0)) - 2D_{ij} \exp(-\beta(r_{ij} - r_0)), \quad (5)$$

式中, D_{ij} 和 β 分别为决定势阱深度和陡度的参数; r_0 为 i, j 原子间的平衡间距.

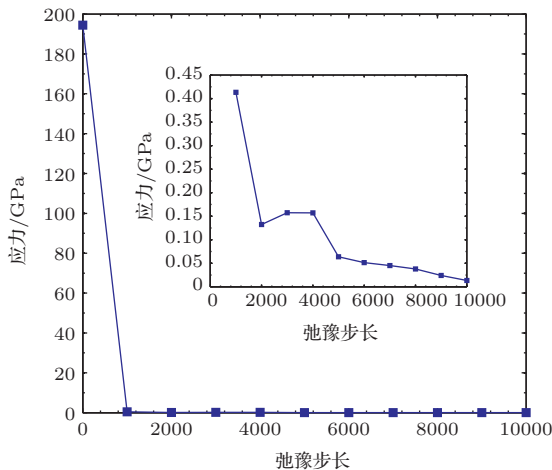


图6 弛豫过程应力的变化

模拟过程中将 WC 基底金刚石涂层膜基界面模型沿 X, Y 方向设置为周期性边界条件, 以降低表面效应对模拟结果的影响. 沿 Z 方向固定 WC 底层原子, 采用 Nose-Hoover 热浴法进行温度调节^[13-15], 控制温度分别在 0, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800 K, 拉伸加载前首先在 NPT 系综下对模型进行充分弛豫^[16], 设定弛豫步长为 10000 步, 以降低体系的残余应力. 如图 6 和图 7 所示, 弛豫后, 其内部残余应力基本消除, 体系能量也达到最小化. 接着对 WC 基底金刚石涂层膜基界面模型沿 Z 方向进行拉伸应变加载, 每步应变量为 0.05, 弛豫步长为 1000, 时间步长为 0.001 ps, 持续加载, 直至模型被拉断. 模拟过程得到拉伸方向原子的

平均应力及体系能量, 其中, 平均应力的计算公式为^[17-19]

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{-1}{2V_0} F_{ij}^{\beta} r_{ij}^{\alpha}, \quad (6)$$

式中, $\sigma_{\alpha\beta}$ 为在笛卡尔坐标下系统原子水平的平均应力; F_{ij}^{β} 和 r_{ij}^{α} 分别为原子 i 和原子 j 之间的相互作用力和距离; V_0 为初始状态下模型的体积.

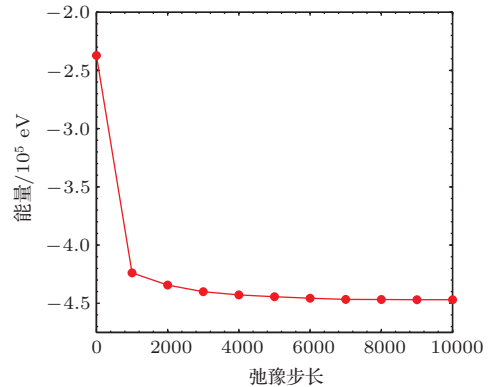


图7 弛豫过程能量的变化

3 计算结果与分析

对仿真数据进行后续处理, 得到不同仿真温度下模型的应力应变曲线及体系能量随应变的变化. 图 8 和图 9 分别为仿真温度在 300 K 时模型的应力应变曲线和能量随应变的变化. 当应变为 0.05 时, 拉伸应力值达到最大值 6.61 GPa, 可以认为 6.61 GPa 即为所建模型在 300 K 温度条件下的拉伸强度, 并得到 300 K 温度下模型的平衡能量为 -525854 eV. 依据上述处理方法, 得到表 2 所列的 0—800 K 温度范围内模型拉伸强度及体系能量.

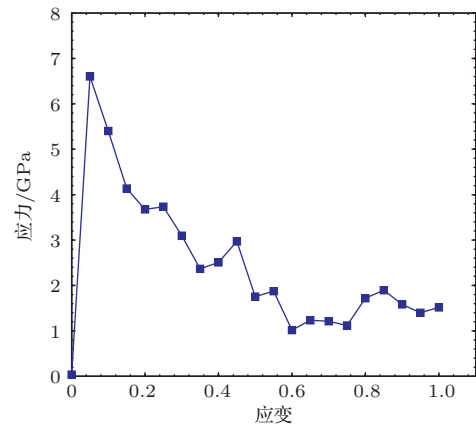


图8 300 K 时模型的应力应变曲线

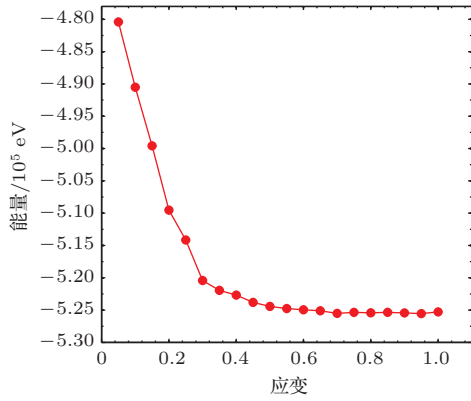


图9 300 K时能量随应变的变化

表2 不同温度时金刚石涂层膜基界面拉伸强度和体系能量

| 温度/K | 拉伸强度/GPa | 体系能量/eV |
|------|----------|---------|
| 0 | 27.77 | -517375 |
| 100 | 12.09 | -518782 |
| 200 | 9.68 | -522697 |
| 300 | 6.61 | -525854 |
| 400 | 6.21 | -525131 |
| 500 | 5.71 | -526572 |
| 600 | 5.48 | -526476 |
| 700 | 4.86 | -526956 |
| 800 | 4.58 | -526844 |

图10和图11分别为拉伸强度和体系能量随温度的变化. 从图10和图11可以看出: 在温度由0 K上升到800 K的过程中, 金刚石涂层膜基界面的拉伸强度呈下降趋势, 体系能量的变化趋势与拉伸强度变化趋势相仿; 温度为0 K时, 金刚石涂层膜基界面拉伸强度最大, 为27.77 GPa, 体系能量也为最大值-517375 eV; 温度为100 K时, 拉伸强度为12.09 GPa, 体系能量为-518782 eV, 拉伸强度和体系能量分别下降了56.5%和0.27%; 温度为300 K时, 拉伸强度为6.61 GPa, 体系能量为-525854 eV, 相比于0 K时的拉伸强度和体系能量分别下降了76.2%和1.64%; 温度为500 K时, 拉伸强度为5.71 GPa, 体系能量为-526572 eV, 相比于0 K时的拉伸强度和体系能量分别下降了79.4%和1.78%; 温度为800 K时, 拉伸强度为4.58 GPa, 体系能量为-526844 eV, 相比于0 K时的拉伸强度和体系能量分别下降了83.5%和1.83%. 由数据分析结果可知: 温度为0—300 K时, 拉伸强度下降明

显; 温度为300—800 K时, 拉伸强度基本呈线性下降, 下降趋势减缓. 体系能量在整个温度区间内数值上降幅不明显, 但变化趋势基本与拉伸强度变化趋势相当, 在一定程度上也说明了拉伸强度与体系能量随温度变化的一致性.

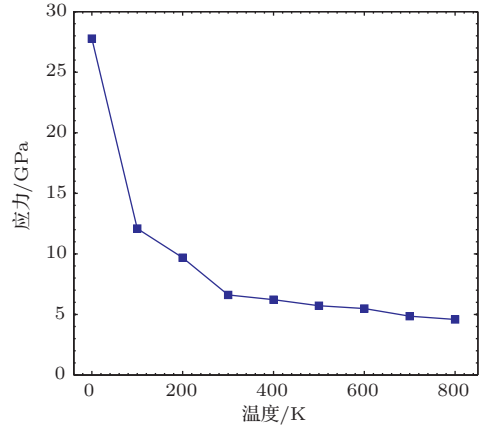


图10 拉伸强度随温度的变化

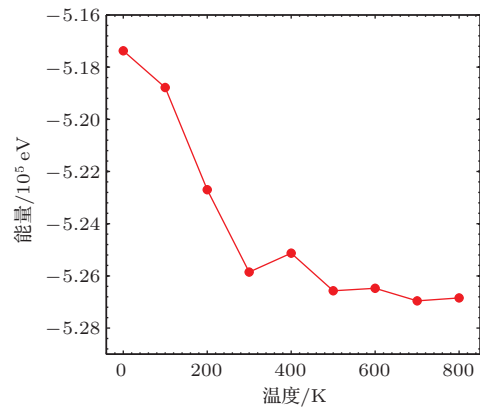


图11 体系能量随温度的变化

4 结论

本文基于分子动力学方法, 建立了硬质合金基底金刚石涂层膜基界面三维模型, 并在热力学温度0—800 K范围内对其力学性能进行了分子动力学仿真计算. 研究表明, 温度对硬质合金基底金刚石涂层膜基界面结合强度的影响非常显著, 在温度由0 K上升到800 K的过程中, 金刚石涂层膜基界面拉伸强度呈下降趋势, 在0—300 K范围内, 下降趋势明显, 在300—800 K范围内, 下降趋势较缓, 并且体系能量随温度的上升同样呈下降趋势, 两者具有较好的一致性.

参考文献

- [1] Matthias S 2014 *Compr. Hard Mater.* **3** 269
- [2] Yang J H C, Teii K 2012 *Thin Solid Film* **520** 6566
- [3] Jian X G, Chen M, Sun F H, Zhang Z M 2004 *Rare Metal Mater. Eng.* **33** 1229 (in Chinese) [简小刚, 陈明, 孙方宏, 张志明 2004 稀有金属材料与工程 **33** 1229]
- [4] Jian X G, Shi L D, Chen M, Sun F H 2006 *Diamond Relat. Mater.* **15** 313
- [5] Morono A, de Vicente Gonzalez S M, Hodgson E R 2007 *Fusion Eng. Design* **82** 2563
- [6] Xu F, Xu J H, Yue M F, Zheng L, Lu W Z, Zuo D W 2013 *Diamond Relat. Mater.* **34** 70
- [7] Saurav G, Luo X C, Reuben R L 2013 *Tribol. Int.* **57** 272
- [8] Lan H Q, Xu C 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 013301 (in Chinese) [兰惠清, 徐藏 2012 物理学报 **61** 013301]
- [9] Li X W, Ke P L, Zhang H, Wang A Y 2013 *Appl. Surf. Sci.* **273** 670
- [10] Hui Z X, He P F, Dai Y, Wu A H 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 074401 (in Chinese) [惠治鑫, 贺鹏飞, 戴璞, 吴艾辉 2014 物理学报 **63** 074401]
- [11] Shen B, Sun F H 2010 *Diamond Relat. Mater.* **19** 723
- [12] Liu L M, Wang S Q, Ye H Q 2004 *Acta Mater.* **52** 3681
- [13] Li Y, Ramesh K T, Chin E S C 2007 *Compos. Mater.* **41** 27
- [14] Jian X G, Zhang Y H 2014 *Adv. Mater. Res.* **898** 41
- [15] Liu P, Zhang Y W 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 231912
- [16] Bedrov D, Grant D, Smith J 1999 *Phys. Chem. B* **103** 3791
- [17] Ma B, Rao Q H, He Y H, Wang S L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 176103 (in Chinese) [马彬, 饶秋华, 贺跃辉, 王世良 2013 物理学报 **62** 176103]
- [18] Zheng D L, Chen S D, Soh A K, Ma Y 2010 *Comp. Mater. Sci.* **48** 551
- [19] Chen S D, Ke F J, Zhou M, Bai Y L 2007 *Acta Mater.* **55** 3169

The effect of temperature on the mechanical properties of the diamond coating at the film-substrate interface*

Jian Xiao-Gang[†] Zhang Yun-Hua

(School of Mechanical Engineering, Tongji University, Shanghai 201804, China)

(Received 7 July 2014; revised manuscript received 17 September 2014)

Abstract

The model of the diamond coating at the film-substrate interface is established by using the molecular dynamic method. The interaction between the atoms in this model is described by the Morse potential function and Tersoff potential function. Based on the above, we carry out the molecular dynamic simulation of the mechanical properties of the model in a temperature range from 0 to 800 K. The simulation results show that the tensile strength of diamond coating at the film-substrate interface presents a downward trend as the temperature rises from 0 to 800 K: the downward trend is evident when the temperature is in a range of 0–300 K, and the downward trend is smooth when the temperature is in a range of 300–800 K. Meanwhile, the variation of system energy with temperature presents a downward trend similar to the variation trend of the tensile strength.

Keywords: diamond coating, film-substrate interface, molecular dynamic, adhesive strength

PACS: 67.30.hp, 67.30.hr, 31.15.xv, 68.35.Gy

DOI: 10.7498/aps.64.046701

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50605047, 51275358).

† Corresponding author. E-mail: jianxgg@tongji.edu.cn