

金刚石与钛间原子热压扩散行为的分子动力学模拟

袁建东, 于爱兵, 邹 翮, 赵 硕, 李 毅, 吴其亮

(宁波大学 机械工程与力学学院, 浙江 宁波 315211)

摘 要: 应用分子动力学方法模拟了金刚石与钛在热压扩散过程中的原子扩散行为, 模拟了不同扩散温度下金刚石与钛界面的原子扩散过程, 得到了界面的原子浓度分布、扩散速度以及模拟扩散系数; 采用热压扩散法在金刚石表面镀覆钛层并测量界面的扩散带宽度。研究表明: 在热压扩散过程中, C原子的扩散速度大于Ti原子; 随着扩散温度的升高, 原子存在低速和快速 2 个扩散阶段。通过热压扩散的分子动力学模拟对模拟的扩散系数进行数据拟合, 能够确定C和Ti原子的扩散因子和扩散激活能, 从而简单、有效地确定原子的扩散系数计算公式。金刚石与钛扩散带宽度的计算值与实测值相近, 应用分子动力学方法获得的原子扩散系数公式是可行的。

关键词: 分子动力学; 热压; 扩散; 金刚石; 钛

中图分类号: O613.71; TG111.6

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2022)01-0159-07

金刚石在热、电、光、化学及力学方面具有优良的性能, 在工业领域中常作为半导体材料、电极材料、光学窗口材料、生物传感器以及超硬刀具材料等^[1-3]。在金刚石的实际应用过程中, 通常需要金刚石与金属、树脂和陶瓷等材料进行复合, 但是由于金刚石化学惰性高, 极难与其他物质产生化学反应形成牢固的结合^[4-6]。因此, 在金刚石的工程应用中, 往往需要在金刚石表面镀覆活性金属, 以改善金刚石与其他材料的结合性能^[7-9]。

在金刚石表面镀覆活性金属的过程中通常发生原子间的相互扩散现象, 原子扩散的程度决定了金刚石表面镀覆的质量。研究人员开展了相关实验, 研究金刚石镀覆过程中的原子扩散现象。周洪宇等^[10]采用真空离子镀在金刚石表面镀Cu, 在界面处可观察到明显的扩散区, 增强了界面连接强度。Liang等^[11]采用表面活化键合技术实现了单晶金刚石与Si的结合, 通过SEM观察到C原子和Si原子在结合界面附近相互扩散形成界面中间层, 降低了界面间的残余应力。Ji等^[12]通过热压扩散工艺制备金刚石/Al复合材料, 经XRD和热导仪测试发现, 界面反应改变了界面结构, 界面间的扩散结合能有效降低界面热阻, 增强复合材料的热导率。Kim等^[13]通过盐浴法在金刚石表面镀覆Cr, 采用EDS测试金刚石和Cr之间的扩散带, 结果表明, 镀覆温度升高, 镀层厚度增加。王鹏鹏等^[14]采用压力熔渗法制备Cr改性的金刚石/Cu复合材料, 测试了界面结

构, EDS测试结果表明, 金刚石和Cu在界面间出现了过渡性元素分布, Cr元素扩散至金刚石表面生成碳化铬, 增强了界面的结合。综上所述, 现有的研究工作主要观察以及测试了金刚石镀覆过程中原子扩散现象以及原子扩散对金刚石复合材料性能和质量的影响, 但在镀覆过程中金刚石与镀层之前的原子动态扩散过程以及反映原子扩散速率的扩散系数还缺少深入的研究。例如, 界面中各原子的扩散速度有何差别? 原子扩散速率与扩散温度之间存在什么关系? 如何简单有效地确定扩散系数公式中的扩散因子和扩散激活能?

分子动力学方法可用于分析材料变化过程中的原子运动状态。本研究应用分子动力学方法模拟金刚石与钛在热压扩散过程中的原子扩散方式和扩散速度, 确定出原子扩散系数公式中的扩散因子和扩散激活能, 并通过热压扩散实验验证了通过分子动力学模拟确定的金刚石与钛热压扩散公式的可行性。

1 分子动力学的计算参数与模型

1.1 势函数

用于描述原子间相互作用的势函数是分子动力学模拟的基础, 势函数的选择不仅决定了模拟的准确程度, 还决定了模拟的计算时间。MEAM是一种描述金属的多体势模型, 描述的系统总能量由相互作用对势能和原子嵌入能组成, 适于描述金属原子间扩散的势函数,

收稿日期: 2021-01-26

基金项目: 国家自然科学基金(51875294); 宁波市科技创新 2025 重大专项(2018B10006)

作者简介: 袁建东, 男, 1995 年生, 硕士, 宁波大学机械工程与力学学院, 浙江 宁波 315211, E-mail: yuanjiandong@live.com

可以采用MEAM势函数来描述金刚石、钛以及金刚石与钛之间的原子作用，MEAM势函数表达式如下^[15]：

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

$$F_i(\bar{\rho}_i) = A_i E_i^0 \bar{\rho}_i \ln \bar{\rho}_i \quad (2)$$

式中， E 为原子系统的总能量， $\bar{\rho}_i$ 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*ij*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。

Kim等^[16]通过拟合已知合金系统，类比优化相关参数得到的MEAM势函数较好地描述了C、Ti以及Ti-C之间的相互作用，且与第一性原理结果相近，表 1 和表 2 为势函数的相关参数，其中， E_c 为结合能， r_c 为最近邻距离。

1.2 分子动力学模型

金刚石与钛层热压扩散模型由金刚石晶体和钛晶体构建。金刚石的晶格类型为正四面体，晶格常数为 $a=b=c=0.357$ nm，钛的晶格类型为密排六方，晶格常数为 $a=b=0.295$ 11 nm、 $c=0.4683$ nm^[17,18]。金刚石的模型尺寸为 7.050 75 nm×1.695 75 nm×7.854 nm，钛的模型尺寸为 7.082 64 nm×1.703 82 nm×7.710 59 nm，总原子个数为 23 476，其中，C原子 17 800 个，Ti原子 5676 个。在模型的*X*，*Y*，*Z*方向上均设定周期性边界条件。为防止模拟时体系原子向*Z*轴两边扩散，将顶部和底部 6 层原子设为刚体，建立的分子动力学模型如图 1 所示。

采用LAMMPS软件进行分子动力学模拟，系统设定为NVT系综，模拟步长为 0.001 ps，原子初始速度状态由按Maxwell-Boltzman速率分布随机赋予。首先将初始构型在 293 K条件下弛豫 60 ps，然后将系统升温至设定温度，结合热压扩散实验的扩散温度，设定

表 1 C与Ti的MEAM势参数

Table 1 MEAM potential parameters of C and Ti

Element	E_c/eV	r_c/nm	Structural parameter											
			B	A	β^0	β^1	β^2	β^3	t^1	t^2	t^3	C_{min}	C_{max}	d
C	7.37	0.154	4.45	1.18	4.25	2.8	2.0	5.0	3.2	1.44	-4.48	1.41	2.8	0
Ti	4.87	0.292	1.1	0.66	2.7	1.0	3.0	1.0	6.8	-2.0	-12	1	1.44	0

表 2 Ti-C的MEAM势参数

Table 2 MEAM potential parameters of Ti-C

Element	E_c/eV	r_c/nm	Structural parameter								
			B	$C_{min}(121)$	$C_{min}(212)$	$C_{min}(112)$	$C_{min}(122)$	$C_{max}(121)$	$C_{max}(212)$	$C_{max}(112)$	$C_{max}(122)$
Ti-C	5.34	0.2210	2.419	0.64	0.64	2.064	2.064	1.44	2.8	2.8	2.8

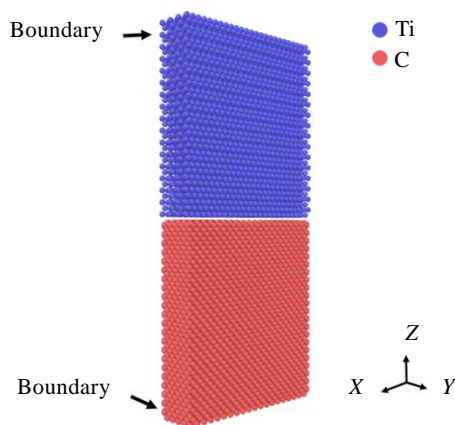


图 1 金刚石与钛间热压扩散分子动力学模型

Fig.1 Molecular dynamics model of hot-pressed diffusion between diamond and titanium

模拟温度范围为 803~1053 K。采用Nose-Hoover控温方法进行等温控制，升温速率为 6.6 K/ps，到达设定温度后弛豫 500 ps。通过弛豫，优化原子结构使体系达到热平衡，进入相对稳定的状态。

2 实验

选用直径为 5 mm的聚晶金刚石 (PCD) 复合片作为基体材料，在PCD的上表面放置尺寸为 7 mm×7 mm×0.02 mm、牌号为TA1的高纯钛箔。将上述真空热压扩散的实验材料安装在自制装夹装置中，如图 2 所示。使用液压压力机对压板施加压力，并用螺栓紧固压板进行保压。将装夹完成的试样放入高真空热处理炉中，当炉内真空度达到 9.3×10^{-3} Pa时，加热试样至设定的扩散温度并保温 2 h。保持 10 K/min的升温速率，通过前期实验确定热压扩散的温度范围为 853~1003 K。

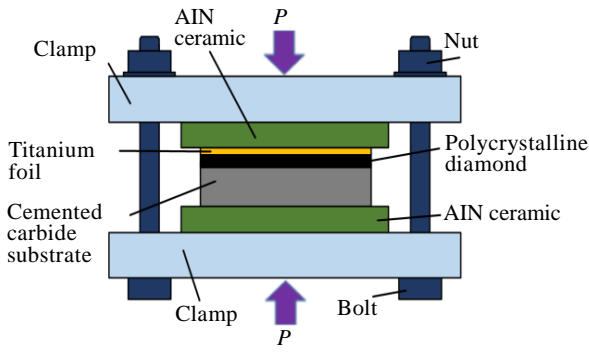


图 2 真空热压扩散实验的试样装夹示意图

Fig.2 Schematic diagram of specimen clamping for vacuum hot pressing diffusion method

试样随炉冷却至室温，取出并用粒度为 3000#的SiC砂纸打磨钛层表面，以去除PCD镀钛层的表面杂质。采用场发射扫描电子显微镜观察试样界面形貌，并进行元素分析。

3 结果与讨论

3.1 扩散过程

图 3 为不同扩散温度下，金刚石与钛层间界面的原子扩散的模拟结果。可以看出，当扩散温度从 803 K 上升到 1003 K 时，原子扩散距离也随之增大，金刚石与钛层之间的扩散带厚度不断变大，金刚石表层被激活的游离C原子不断增多。在扩散过程中，主要以界

面附近大量的游离C原子迁移为主。

以 0.3 nm 为单位厚度从下至上将图 3 所示各模型切片，计算每一切片内C原子和Ti原子的原子数量比，便可得出界面间的原子浓度变化曲线。图 4 为不同扩散温度下，金刚石与钛层之间界面的原子比例分布图。一般认为，各部分中扩散原子的比例均超过 5% 即为扩散区域^[19]。图 4 中虚线区域为金刚石与钛层的原子扩散带，可以观察到界面间的原子扩散距离随着扩散温度的升高而增大。

3.2 模拟扩散系数

由于扩散系数能够反映原子的扩散速度，因此，本研究通过模拟扩散系数来探究扩散温度对原子扩散速度的影响。在分子动力学模拟中，通常采用原子的均方位移函数来确定扩散系数。均方位移（MSD）与时间 t 的函数关系式如式（3）所示^[20]：

$$MSD(t) = \langle (x - x_0)^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [x_i(t) - x_i(0)]^2 \quad (3)$$

式中， x_0 为原子的参考位置， x 为原子的扩散位置， $x_i(t)$ 为原子 i 在 t 时的矢量位置， $x_i(0)$ 为原子 i 的初始矢量位置， N 为系统的原子数。

当系统的模拟时间较长时，原子均方位移函数的极限值与扩散系数 D 的关系如式（4）所示：

$$\lim_{t \rightarrow \infty} MSD(t) = c + 2\lambda Dt \quad (4)$$

式中， c 为常数； λ 为系统维度； D 为扩散系数。

将式（3）对时间 t 求一阶导数后即可得到原子均

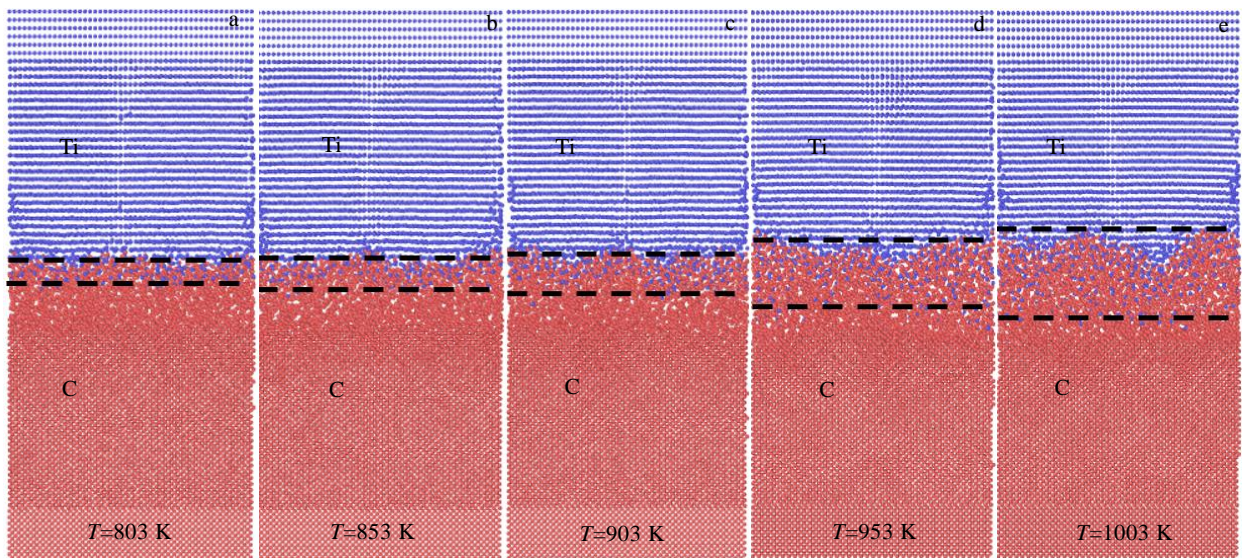


图 3 不同扩散温度下金刚石与钛层间界面的原子扩散分布

Fig.3 Distribution of atomic diffusion at the interface between diamond and titanium at different diffusion temperatures: (a) 803 K, (b) 853 K, (c) 903 K, (d) 953 K, and (e) 1003 K

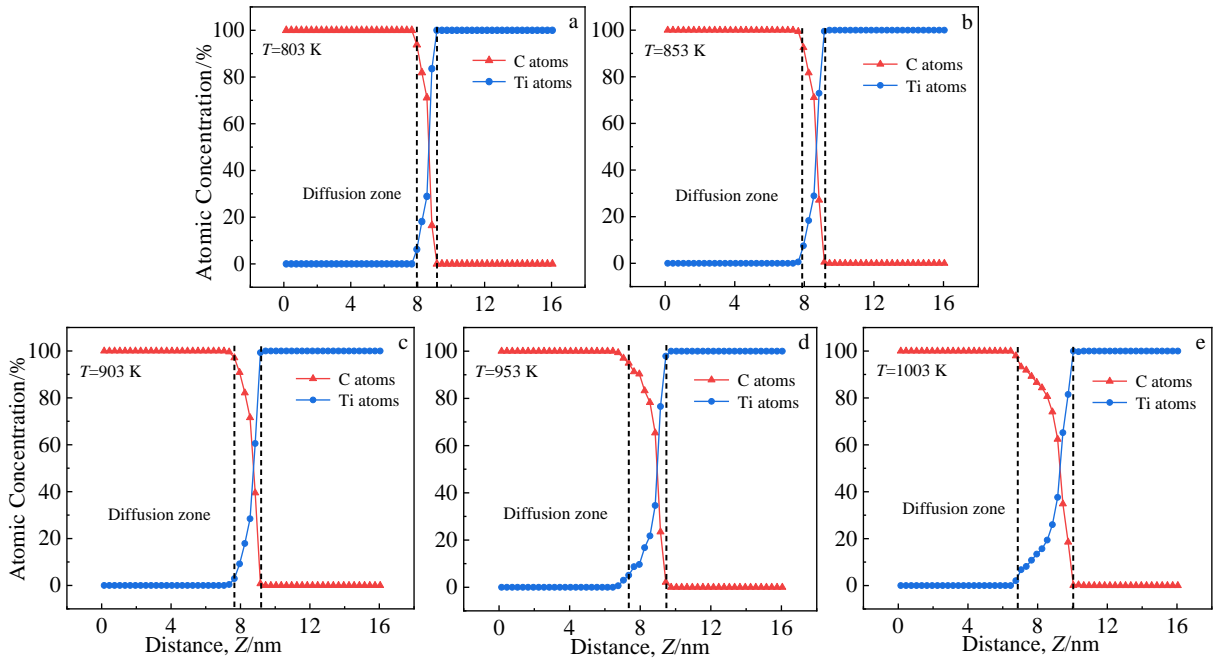


图 4 不同扩散温度下金刚石与钛层间界面的原子比例分布

Fig.4 Distribution of atomic ratio at the interface between diamond and titanium at different diffusion temperatures: (a) 803 K, (b) 853 K, (c) 903 K, (d) 953 K, and (e) 1003 K

方位移的速率常数，代入式(4)则可以得到原子均方位移速率常数的极限值与扩散系数 D 的关系：

$$D = \frac{1}{2\lambda N} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N [x_i(t) - x_i(0)]^2 \quad (5)$$

本研究进行的是三维模拟，则 $\lambda=3$ ，因此，扩散系数 D 为原子均方位移速率常数的极限值的 1/6 倍。

通过LAMMPS软件模拟得到C原子与Ti原子的均方位移函数曲线，如图5所示。可以看出，随着扩散温度的增加，C原子与Ti原子的均方位移的速率常数均随温度增加逐渐增大。如图5c所示，原子的扩散速度

可以划分为 2 个阶段，当扩散温度小于 903 K 时，C 原子与 Ti 原子均方位移的速率常数较小，原子处于低速扩散阶段 I；当扩散温度大于 903 K 时，C 原子与 Ti 原子均方位移的速率常数明显增大，原子处于快速扩散阶段 II。此外，在各扩散温度下，C 原子均方位移的速率常数均大于 Ti 原子均方位移的速率常数，说明 C 原子的扩散速度要比 Ti 原子的扩散速度快，界面扩散以 C 原子扩散为主。

对图 5 中的原子均方位移函数曲线进行线性拟合，可以得到均方位移的速率常数，再结合式(5)，便

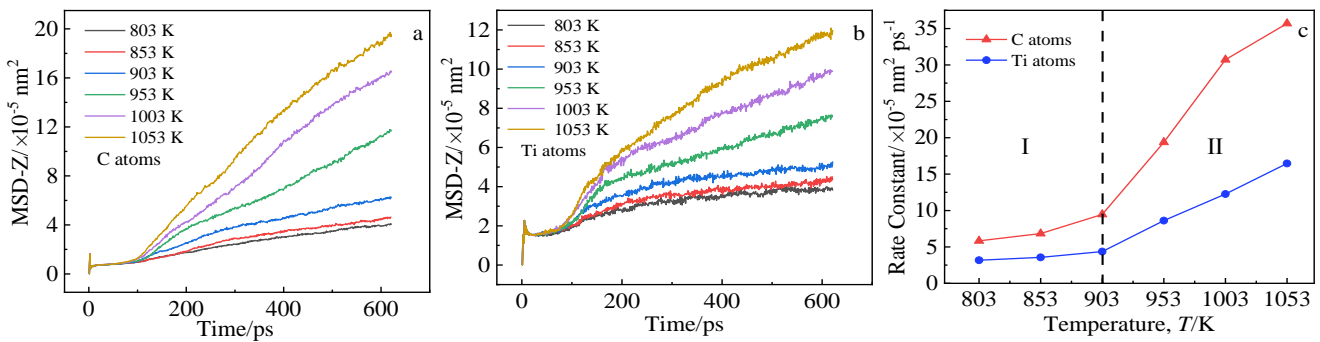


图 5 C 原子和 Ti 原子的均方位移曲线及均方位移速率常数与扩散温度的关系

Fig.5 Mean square displacement (MSD) curves of C (a) and Ti (b) atoms and relationship between the rate constant of mean square displacement and the diffusion temperatures (c)

可计算出不同扩散温度下的C原子与Ti原子的模拟扩散系数值，结果如表 3 所示。

3.3 扩散系数公式

在扩散过程中，扩散系数 D 与扩散温度 T 之间满足 Arrhenius 关系^[21]：

$$D = D_0 \exp(-Q/RT) \quad (6)$$

式中， D_0 为扩散因子， Q 为扩散激活能， R 为气体常数 8.314 J/(mol K) 。

由式(6)可知，扩散系数 $\ln D$ 与 $1/T$ 呈线性关系。由表 3 可得到如图 6 所示的C原子与Ti原子的扩散系数与扩散温度的关系图。对表 3 中的散点数据进行线性拟合，便可得到 $\ln D-1/T$ 关系曲线，如图 6 中直线所示。

求解 $\ln D-1/T$ 关系曲线的截距和斜率，可分别得出 C 原子、Ti 原子的扩散因子 D_0 和扩散激活能 Q 的数值。C 原子的扩散因子 $D_0=3.0266 \times 10^{-9} \text{ cm}^2/\text{s}$ ，扩散激活能 $Q=5.48 \times 10^4 \text{ J/mol}$ ，Ti 原子的扩散因子 $D_0=4.8977 \times 10^{-10} \text{ cm}^2/\text{s}$ ，扩散激活能 $Q=4.50 \times 10^4 \text{ J/mol}$ 。将上述 D_0 和 Q 数值代入式 (6) 便可确定出金刚石与钛在热压扩散过程中C原子、Ti原子的扩散系数公式：

$$D_C = 3.0266 \times 10^{-9} \exp(-6590.3527/T) \quad (7)$$

$$D_{Ti} = 4.8977 \times 10^{-10} \exp(-5411.6160/T)$$

综上所述，应用分子动力学方法能够简单、有效地模拟金刚石与钛在热压扩散过程中的原子扩散过程

表 3 C、Ti 原子的模拟扩散系数值

Table 3 Simulated diffusion coefficient values of C and Ti atoms ($\times 10^{-12} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$)

T/K	803	853	903	953	1003	1053
D_C	0.9939	1.1627	1.6464	3.1293	4.8345	5.7843
D_{Ti}	0.6908	0.7765	0.9911	1.6946	2.3641	3.0589

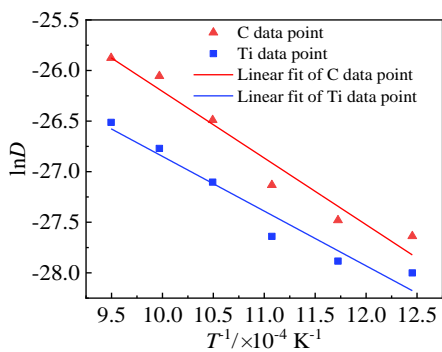


图 6 原子扩散系数与扩散温度的关系

Fig.6 Relationship between atomic diffusion coefficient and diffusion temperature

和扩散行为，得到合理的原子扩散系数公式。应用分子动力学方法，克服了热压扩散实验中原子运动不可观察的困难，在理论上可以模拟任意扩散温度，不存在客观实验条件的限制问题，可以避免大量耗时和高成本的实验，能够以低成本方式获得热压过程中的原子扩散特性和规律。

3.4 扩散带宽度对比

为了验证分子动力学模拟得到的C原子、Ti原子的扩散系数式(7)的准确性，进行了界面扩散带宽度的计算值与测试值的对比研究。一方面，根据式(7)计算出不同温度下的扩散系数，再计算出理论的扩散带宽度。另一方面，采用热压扩散法在金刚石表面镀覆钛层，并测试界面的扩散带宽度，对比上述二者结果。

在实验过程中，当扩散温度为 853 K 时，观察到在PCD边缘处钛层产生翘曲现象；当扩散温度为 903、953 K 时，PCD表面所镀覆的钛层平整，与PCD之间结合紧密，且PCD内部结构完整，没有产生裂纹；当扩散温度为 1003 K 时，钛层良好，但PCD内部出现少许裂纹，PCD与硬质合金基体间产生明显的裂缝，出现了明显的热损伤现象。根据上述实验结果，选择扩散温度范围在 853~953 K 之间。图 7 为镀钛PCD的界面 EDS 线扫描。当扩散温度为 853 K 时，PCD与钛层界面之间的C元素与Ti元素发生了轻微扩散，产生的扩散带宽度为 2.5 μm ；当扩散温度为 903 K 时，界面间的扩散带宽度增大到 3 μm ；而在 953 K 时，产生的扩散带宽度为 4.3 μm 。

金刚石与钛界面扩散带的测试值已通过热压扩散实验获得，下面根据扩散系数求解扩散带宽度的理论计算值。扩散系数 D 与原子扩散距离 x 的关系为^[21]：

$$C(x, t) = C_s \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \quad (8)$$

式中， C 为碳在钛中的扩散浓度， C_s 为钛表面碳的初始浓度， t 为扩散时间， erf 为高斯误差函数。

由式(7)可计算出C原子、Ti原子的扩散系数 D_C 、 D_{Ti} 。钛表面碳的初始浓度 $C_s=95\%$ ，扩散带边界碳的扩散浓度 $C(x, 7200)=5\%$ ，根据式(8)可计算出C原子、Ti原子的扩散距离 x 的值。扩散系数 D_C 、 D_{Ti} 与原子扩散距离 x 的计算值如表 4 所示。 x_C 为C原子的计算扩散距离、 x_{Ti} 为Ti原子的计算扩散距离。在相同的扩散温度下，C原子的扩散距离 x_C 均大于Ti原子的扩散距离 x_{Ti} ，即 $x_C > x_{Ti}$ 。

图 8 为原子扩散距离随扩散温度变化的曲线。由于 $x_C > x_{Ti}$ ，因此，取 x_C 为扩散带宽度的理论计算值。由图 8 可知，理论计算值与实验测得的扩散带宽度相近，且扩散宽度的计算值与实验值误差分别为： $E_{853 \text{ K}}=7.2\%$ ，

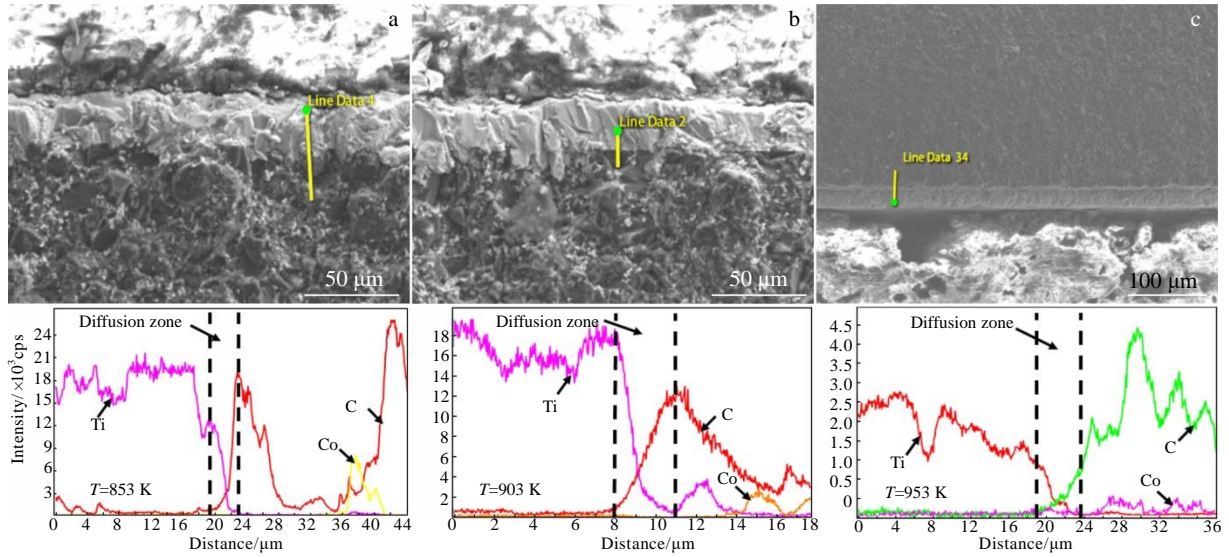


图 7 在不同扩散温度下镀钛PCD的界面EDS线扫描结果

Fig.7 EDS line scan results of interface of titanium-coated PCD at different diffusion temperatures: (a) 853 K, (b) 903 K, and (c) 953 K

表 4 不同扩散温度下扩散系数与原子扩散距离的计算值

Table 4 Calculated values of diffusion coefficient and atomic diffusion distance at different diffusion temperatures

T/K	$D_C/\times 10^{-12} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$	$D_{Ti}/\times 10^{-12} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$	$x_C/\mu\text{m}$	$x_{Ti}/\mu\text{m}$
853	1.335	0.861	2.687	2.157
903	2.048	1.223	3.327	2.571
953	3.004	1.674	4.029	3.008

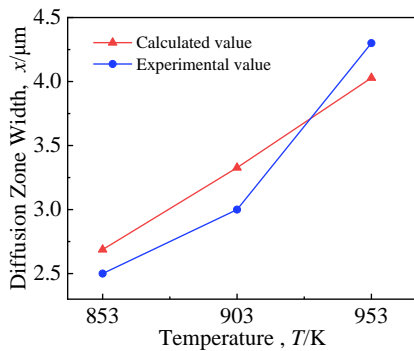


图 8 扩散带宽度随扩散温度的变化曲线

Fig.8 Variation curves of diffusion zone width with diffusion temperature

$E_{903 \text{ K}}=10.6\%$, $E_{953 \text{ K}}=6.3\%$ 。上述结果表明, 可以用分子动力学方法简单、有效地确定扩散系数公式中的各项系数。

4 结 论

1) 在金刚石与钛的热压扩散过程中, C原子的扩

散速度大于Ti原子; 随扩散温度升高, 原子扩散速度存在 2 个阶段: 低速扩散阶段和快速扩散阶段。

2) 对模拟的C、Ti原子扩散系数进行数据拟合, 得到扩散因子和扩散激活能的数值, 从而简单有效地确定了C原子、Ti原子在热压扩散过程中的扩散系数公式。

3) 金刚石与钛的热压扩散带宽度计算值与实测值相近, 应用分子动力学方法获得原子扩散系数公式是有效的。

参考文献 References

[1] Long Weimin(龙伟民). *Brazing Technology of Superhard Tools(超硬工具钎焊技术)*[M]. Zhengzhou: Henan Science and Technology Press, 2017: 1

[2] Blank V, Popov M, Pivovarov G *et al. Diamond and Related Materials*[J], 1999, 8(8-9): 1531

[3] Qureshi Anjum, Gurbuz Yasar, Howell Mick *et al. Diamond and Related Materials*[J], 2010, 19(5-6): 457

[4] Molina J M, Louis E. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2018, 736: 246

[5] Guo Lei, Zhang Xinrong, Chen Shibin *et al. Materials*[J], 2019, 12(1): 125

[6] Nguyen Thang Phan, Pazhouhanfar Yaghoub, Delbari Seyed Ali *et al. Diamond and Related Materials*[J], 2020, 106: 107 828

[7] Wang Yunlong(王云龙), Duan Kaiyue(段凯悦), Wang Kaikun(王开坤) *et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2018, 47(7): 2011

[8] Zhang Xiaoyu(张晓宇), Lin Weikang(蔺伟康), Xu Min(许

- 旻) *et al. Surface Technology*(表面技术)[J], 2018, 47(5): 27
- [9] Khmel'nitsky Roman A, Evlashin Stanislav A, Martovitsky Victor P *et al. Crystal Growth & Design*[J], 2016, 16(3): 1420
- [10] Zhou Hongyu(周洪宇), Yin Yanli(尹衍利), Wu Chunjing(吴春京) *et al. The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2017, 27(9): 1855
- [11] Liang Jianbo, Masuya Satoshi, Kim Seongwoo *et al. Applied Physics Express*[J], 2018, 12(1): 16 501
- [12] Ji Gang, Tan Zhanqiu, Li Xiaopeng *et al. Materials Science Forum*[C]. Zurich: Trans Tech Publications Ltd, 2018, 941: 2184
- [13] Kim Hwajung, Choi Heelack, Ahn Yongsik. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2019, 805: 648
- [14] Wang Pengpeng(王鹏鹏), Guo Hong(郭宏), Zhang Ximin(张习敏) *et al. Chinese Journal of Rare Metals*(稀有金属)[J], 2015, 39(4): 308
- [15] Baskes M I. *Physical Review B*[J], 1992, 46(5): 2727
- [16] Kim Youngmin, Lee Byeongjoo. *Acta Materialia*[J], 2008, 56(14): 3481
- [17] Sun Zhaolong(孙照龙). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Changchun: Jilin University, 2020
- [18] Zhu Ying(朱瑛), Zhang Yincheng(张银成), Qi Shunhe(齐顺河) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2016, 45(4): 897
- [19] Liu Xiaogang(刘小刚), Zhang Shun(张顺), Li Baiyang(李百洋) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2018, 47(10): 3045
- [20] Zhu Yiyang(朱逸颖). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2016
- [21] Jin Zhengguo(靳正国), Guo Ruisong(郭瑞松), Shi Chunsheng(师春生). *Foundation of Materials Science*(材料科学基础)[M]. Tianjin: Tianjin University Press, 2008: 231

Molecular Dynamics Simulation of Atomic Diffusion Behavior Between Diamond and Titanium During Hot Pressing Process

Yuan Jiandong, Yu Aibing, Zou Pian, Zhao Shuo, Li Yi, Wu Qiliang

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

Abstract: The molecular dynamics method was used to simulate the atomic diffusion behavior between diamond and titanium during the hot pressing diffusion process. The atomic diffusion process at the interface between diamond and titanium at different diffusion temperatures was simulated, and the atomic concentration distribution, diffusion velocity and simulated diffusion coefficient of the interface were obtained. The hot pressing diffusion method was used to coat a titanium layer on the diamond surface and the width of the diffusion band at the interface was measured. The research results show that the diffusion speed of C atoms is greater than that of Ti atoms during the diffusion process. With the increase of the diffusion temperature, there exist two stages of atom diffusion, low speed and fast stages. Data fitting of the simulated diffusion coefficients through the molecular dynamics simulation of hot pressing diffusion can be used to determine the diffusion factors and activation energy values of C and Ti atoms. Thus the calculation formula of atomic diffusion coefficient can be determined through a simple and effective method. The calculated values of diffusion band width of diamond and titanium are close to the measured values, which indicates that the formula of atom diffusion coefficient obtained by the molecular dynamics method is feasible.

Key words: molecular dynamics; hot pressing; diffusion; diamond; titanium

Corresponding author: Yu Aibing, Ph. D., Professor, School of Mechanical Engineering and Mechanics, Ningbo University, Ningbo 315211, P. R. China, E-mail: yuaibing@nbu.edu.cn