

## WCCo硬质合金摩擦磨损行为的分子动力学模拟

娄鹤子, 王海滨, 刘雪梅, 吕皓, 刘超, 林亮亮, 王明胜, 宋晓艳

## Molecular dynamics simulation on friction and wear behavior of WC-Co cemented carbides

LOU He-zi, WANG Hai-bin, LIU Xue-mei, L Hao, LIU Chao, LIN Liang-liang, WANG Ming-sheng, and SONG Xiao-yan

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.19591/j.cnki.cn11-1974/tf.2022040016>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 石墨-镍涂层与泥岩渣土的摩擦磨损研究

Research on friction and wear of graphite-nickel coating and mudstone

粉末冶金技术. 2019, 37(2): 112-117

#### 选择性激光熔化成形CoCrWMo合金工艺优化及摩擦磨损性能

Process optimization and friction and wear properties of CoCrWMo alloys fabricated by selective laser melting

粉末冶金技术. 2021, 39(6): 505-511

#### Cr<sub>2</sub>AlC含量对铜基复合材料摩擦磨损性能的影响

Effects of Cr<sub>2</sub>AlC content on friction and wear properties of copper matrix composites

粉末冶金技术. 2019, 37(3): 184-190

#### 不锈钢与地铁集电靴用浸金属碳材料的摩擦磨损性能研究

Study on friction and wear properties of stainless steel and the metal-impregnated carbon materials used as collector shoe in subway

粉末冶金技术. 2019, 37(4): 243-247, 254

#### 镀钨碳纳米管增强镁基复合材料的摩擦磨损性能研究

Friction and wear properties of magnesium matrix composites reinforced by tungsten-coated carbon nanotubes

粉末冶金技术. 2018, 36(6): 423-428

#### 刹车速度对铜基粉末冶金摩擦材料性能的影响

Effects of braking velocity on friction properties of Cu-based powder metallurgy friction material

粉末冶金技术. 2018, 36(2): 83-88



关注微信公众号, 获得更多资讯信息

# WC-Co 硬质合金摩擦磨损行为的分子动力学模拟

娄鹤子<sup>1,2)</sup>, 王海滨<sup>1,2)</sup>✉, 刘雪梅<sup>1,2)</sup>, 吕皓<sup>1,2)</sup>, 刘超<sup>3)</sup>, 林亮亮<sup>3)</sup>,  
王明胜<sup>3)</sup>, 宋晓艳<sup>1,2)</sup>✉

1) 北京工业大学材料与制造学部, 北京 100124    2) 北京工业大学新型功能材料教育部重点实验室, 北京 100124

3) 厦门钨业股份有限公司, 厦门 361009

✉通信作者, E-mail: [whb@bjut.edu.cn](mailto:whb@bjut.edu.cn) (王海滨); [xysong@bjut.edu.cn](mailto:xysong@bjut.edu.cn) (宋晓艳)

**摘要** 利用分子动力学模拟研究了 WC-Co 硬质合金在不同条件下的摩擦过程, 分析了晶粒尺寸、摩擦载荷和滑动速率等因素对硬质合金摩擦磨损行为的影响, 从原子尺度揭示了硬质合金发生摩擦磨损的微观机制。结果表明, 随晶粒尺寸增大, 相比于晶粒转动, Co 相和 WC 中的位错滑移逐渐在摩擦引起的塑性变形机制中起主导作用。摩擦载荷增大会导致易变形的 Co 粘结相被挤出表面而首先去除, 通过减小晶粒尺寸可以抑制 Co 相的挤出-磨损机制, 进而提高硬质合金的抗滑动磨损性能。滑动速率升高会降低磨损速率, 主要原因是在高速滑动过程中, 亚表层各相中位错的形核扩展缺乏持续的驱动应力, 位错密度较低, WC 不易发生断裂, Co 相被挤出表面造成的磨损程度明显减轻。

**关键词** 硬质合金; 分子动力学模拟; 塑性变形; 位错; 摩擦; 磨损

**分类号** TG142.71

## Molecular dynamics simulation on friction and wear behavior of WC-Co cemented carbides

LOU He-zi<sup>1,2)</sup>, WANG Hai-bin<sup>1,2)</sup>✉, LIU Xue-mei<sup>1,2)</sup>, LÜ Hao<sup>1,2)</sup>, LIU Chao<sup>3)</sup>, LIN Liang-liang<sup>3)</sup>,  
WANG Ming-sheng<sup>3)</sup>, SONG Xiao-yan<sup>1,2)</sup>✉

1) Faculty of Materials and Manufacturing, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China

2) Key Laboratory of Advanced Functional Materials, Ministry of Education of China, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China

3) Xiamen Tungsten Co., Ltd., Xiamen 361009, China

✉Corresponding author, E-mail: [whb@bjut.edu.cn](mailto:whb@bjut.edu.cn) (WANG H B); [xysong@bjut.edu.cn](mailto:xysong@bjut.edu.cn) (SONG X Y)

**ABSTRACT** The friction process of the WC-Co cemented carbides in the different conditions was investigated by molecular dynamics simulation in this work. The effects of grain size, friction load, and sliding velocity on the friction and wear behavior of the cemented carbides were analyzed. The friction and wear microscopic mechanism of the cemented carbides in the atomic scale was revealed. The results show that, with the increase of grain size, the dislocation slip in the Co and WC phases gradually plays more important role in the friction-induced plastic deformation mechanism rather than the grain rotation. The increase of friction load may lead to the deformable Co bonding phase being extruded from the surface and removed first. Nonetheless, the extrusion-wear mechanism of the Co phase can be suppressed by reducing the WC grain size, and the sliding wear resistance of the cemented carbides

收稿日期: 2022-05-12

DOI: [10.19591/j.cnki.cn11-1974/tf.2022040016](https://doi.org/10.19591/j.cnki.cn11-1974/tf.2022040016); <http://pmt.ustb.edu.cn>

can be improved. Besides, the increase of sliding rate may reduce the wear rate. The main reason is that, in the process of high-speed sliding, the nucleation and expansion of dislocation in each phase of the subsurface layer lacks the continuous driving stress, and the dislocation density is low. Therefore, WC is difficult to fracture, and the wear degree caused by Co phase being extruded from the surface is significantly reduced.

**KEY WORDS** cemented carbides; molecular dynamics simulation; plastic deformation; dislocation; friction; wear

通过粉末冶金工艺制造的 WC-Co 硬质合金具有高硬度、高强度、良好的韧性和优异的耐磨性, 作为坯料被广泛用于加工金属切削刀具、矿山开采工具、耐磨零部件等<sup>[1-3]</sup>。此外, 也常利用热喷涂技术将 WC-Co 粉末沉积于金属表面形成涂层, 为基体材料提供表面耐磨、耐蚀防护<sup>[4-6]</sup>。这两类应用均要求 WC-Co 材料具有高的耐磨性, 因此深入理解其摩擦磨损机制对于研发具有更强耐磨性能的硬质合金材料具有重要的指导意义。

目前, 一些实验研究工作从微观层面揭示了 WC-Co 材料的摩擦磨损机制。通常可在磨损轨迹上观察到沟槽、凹坑等<sup>[7]</sup>, 在反复摩擦的磨损表面还可能氧化膜<sup>[8-9]</sup>的存在。这些沟槽和凹坑是由于 WC-Co 材料局部发生了一定程度的塑性变形, 粘结相 Co 受压变形被挤出表面, 进而被磨削掉, 以及 WC 颗粒失去支撑作用而在摩擦力作用下被拔出形成的。在反复滑动摩擦过程中, 已脱落的 WC/Co 磨屑会被进一步粉碎成超细和纳米级颗粒, 并在摩擦热作用下氧化为  $WO_3$  和  $CoWO_4$ , 形成鳞片状的氧化层。对于因缺碳而脆性较大的 WC-Co 材料, 在磨损表面上可以观察到细长裂纹<sup>[10]</sup>的存在。单个 WC 晶粒中塑性应变的累积会导致其发生穿晶断裂<sup>[11]</sup>, 在反复的挤压摩擦下进一步破碎成细小的颗粒。同时, 摩擦过程中 WC/WC 晶界和 WC/Co 相界的断裂<sup>[12]</sup>也是硬质合金材料磨损失效的重要原因。

在实际应用过程中, WC-Co 材料的晶粒尺寸、所承受的压力载荷、摩擦副滑动速率等因素均会对其摩擦行为和耐磨损性能产生影响。研究结果显示, 在不同形式的摩擦过程中, 硬质合金的磨损速率与其晶粒尺寸的关系并不都是单调的。例如, 其抗滑动磨损性能随晶粒尺寸减小是逐渐增强的, 但抗磨粒磨损性能随晶粒尺寸减小是先增强后降低。压力载荷对硬质合金磨损速率的影响基本一致, 即随载荷增加, 磨损速率逐渐升高。而硬质合金与摩擦副的相对滑动速率对其磨损速率的影响则研究较少, 有报道认为磨损速率随相对滑动速率的升高而降低<sup>[13]</sup>。关于这些参数的影响, 在实验研究方面已经

取得了较多的进展<sup>[14-17]</sup>, 但受实验观测技术的限制, 对上述磨损现象内在的作用机制缺乏深入理解。

分子动力学模拟<sup>[18]</sup>作为一种依靠经验的势函数模型来描述分子/原子间相互作用的方法, 在揭示金属<sup>[19-21]</sup>以及石墨烯<sup>[22]</sup>等二维材料的摩擦磨损机制方面已经获得了较好的应用。相关模拟研究认为, 摩擦过程中材料的变形是由于接触区域内的弹性变形、原子非晶化和位错滑移运动而产生的<sup>[23]</sup>。摩擦参数作为影响摩擦行为和耐磨性能的重要因素, 已有研究利用分子动力学模拟开展了这方面的工作。在对晶体铜的分子动力学模拟研究中发现, 摩擦条件的改变会对材料亚表层缺陷的规模和种类会产生重要影响<sup>[24]</sup>。这种模拟方法可从原子尺度对摩擦磨损过程进行深入解析。鉴于此, 本文采用分子动力学模拟方法研究 WC-Co 硬质合金的摩擦学行为和微观磨损机制。通过改变模型中 WC 的晶粒尺寸、施加载荷和摩擦副的滑动速率等参数, 深入理解 WC-Co 材料发生磨损失效的根本原因。

## 1 模拟方法

采用 Voronoi 方法建立了 WC 平均晶粒尺寸分别为 5 nm 和 12 nm 的多晶 WC-Co 模型, 其中 Co 质量分数设定为 12%, 如图 1 所示。首先, 利用开放式可视化工具 OVITO 软件<sup>[25]</sup>将单晶 WC 和 Co 块体进行组合和周期性重复, 得到 WC-Co 组合块体; 然后, 利用 Atomeye 软件中的 Voronoi 方法生成多晶模型, 其中晶粒的取向是随机得到的; 最后, 将建立的半球形金刚石压头和 WC-Co 多晶块体进行组合得到摩擦模拟模型。图 1 示出了典型的模型结构图, 5 nm 和 12 nm 多晶模型的尺寸均为  $40.00\text{ nm} \times 15.05\text{ nm} \times 15.00\text{ nm}$ , 作为摩擦副的金刚石球形压头的直径为 8 nm。该 WC-Co 模型被划分为牛顿层、恒温层和固定层, 分别起到模拟受力运动、控温和刚性支撑的作用。在模拟之前, 需要对整个系统弛豫 50 ps 以达到平衡。首先, 对压头向下施加一定的法向载荷, 使其与 WC-Co 表面发生接触并逐渐压入 2 nm 深度; 随后, 金刚石压头以恒定的速率沿  $X$  方向滑动, 对 WC-Co 产生摩擦作

用, 滑动摩擦距离为 15 nm。整个摩擦过程中, 压头上方施加了恒定的法向载荷。

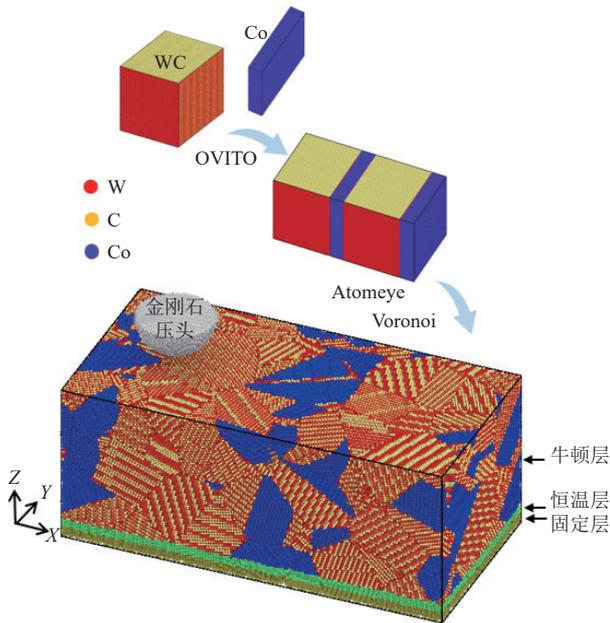


图 1 用于分子动力学模拟摩擦过程的多晶 WC-12%Co 模型建立过程

Fig.1 Modeling process of the polycrystalline WC-12%Co for the molecular dynamics simulation of friction process

采用开源程序 Lammmps<sup>[26]</sup> (Large-scale atomic/molecular massively parallel simulator) 进行上述摩擦过程的分子动力学模拟计算。在模拟中采用 1 fs 的时间步长, 利用 Velocity-Verlet 算法<sup>[27]</sup> 进行原子运动方程的求解。整个系统设置为 NVT 系综, 并在恒温层采用 Langevin 控温法使系统温度保持在

300 K 左右。在模型的 X、Y 方向上设置周期性边界条件, Z 方向上设置自由边界条件。针对本文的 W-C-Co 体系, 利用 Tersoff 势函数<sup>[28-30]</sup> 来描述模拟过程中金刚石压头与 WC-Co 硬质合金基体中原子之间的相互作用, 利用 OVITO 软件进行模拟数据的可视化分析, 可以直观地展示位错等晶体缺陷。

## 2 结果与讨论

### 2.1 WC 晶粒尺寸的影响

图 2 (a) 和图 2 (b) 分别示出了平均晶粒尺寸为 5 nm 的 WC-Co 硬质合金在摩擦前后各相结构变化情况, 通过 OVITO 软件中的 PTM 方法着色, 红色原子代表密排六方 (hexagonal close-packed, HCP) 结构的 WC, 绿色原子代表面心立方 (face-centered cubic, FCC) 结构的 Co, 晶界和变形区的原子为白色。由图 2 可以看出, 在半球形金刚石压头的挤压和滑动摩擦作用下, 靠近表面区域的 WC 晶粒发生了一定程度的转动, 晶界附近未知结构原子数量明显增加, 晶界增宽。在 Co 粘结相中可观察到一定的位错运动, 而 WC 由于晶粒尺寸较小, 晶粒内部没有足够的空间发生位错的增殖和滑移, 因此在 WC 晶粒中未观察到明显的位错或层错。图 2 (c) 为摩擦后不同区域的剪切应变分布, 可直观显示其内部的塑性变形程度, 可以观察到表面接触区域和亚表层中 Co 相区以及晶界/相界处的残余塑性应变程度较高, 表明 WC-Co 合金在当前的摩擦力作用下, 亚表层区域的 WC 仅发生了弹性变形, 但是造成了某些 Co 相及界面区的塑

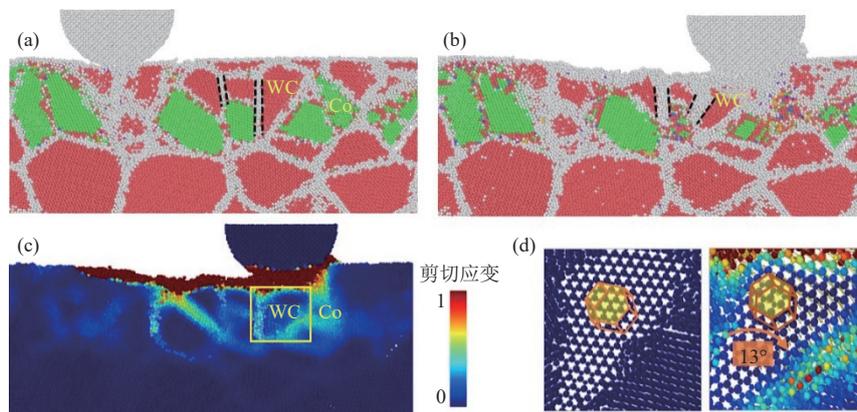


图 2 平均晶粒尺寸为 5 nm 的 WC-Co 硬质合金摩擦初始 (a) 和结束 (b) 的模拟组织以及摩擦结束后的剪切应变分布 (c) 和摩擦过程中 WC 晶粒通过转动协调塑性变形 (d), 其中原子位移矢量显示其运动方向

Fig.2 Simulated microstructure of the WC-Co cemented carbides with the mean grain size of 5 nm at the beginning (a) and the end (b) of the friction process, the shear strain distribution at the end of friction (c), and the plasticity coordination by WC grain rotation during the friction process (d), where the displacement vector of atoms indicates the moving direction

性应变响应，如图 2 (a) 和图 2 (c) 中标记的 Co 晶粒。在摩擦过程中，还观察到较多的 WC 晶粒发生转动，如图 2 (a) ~ 图 2 (c) 中标记的 WC 晶粒，从其高倍图中可观察到晶内原子具有明显的定向移动趋势，相对于图 2 (a) 中的初始位置旋转了 13°，如图 2 (d) 所示。与该 WC 晶粒相邻的 Co 粘结相受挤压发生了严重的塑性变形，内部产生了位错的滑移，因此可观察到较高的剪切应变。根据上述模拟结果可知，当 WC-Co 合金的平均晶粒尺寸较小（例如为 5 nm）时，由摩擦作用引起的塑形变形主要源自 WC 晶粒的转动和少量 Co 粘结相中位错的滑移。

当 WC 平均晶粒尺寸增大至约 12 nm 时，摩擦前后的微观结构如图 3 (a) 和图 3 (b) 所示。由图可知，此时在摩擦作用下 WC-Co 的塑形变形机制主要是由 WC 和 Co 晶粒内部的位错运动、层错

扩展及其交互作用主导。与 5 nm 的 WC-Co 合金不同的是，亚表层的 WC 晶粒中局部也存在塑性应变，如图 3 (b) 和图 3 (c) 标记区域，表明 WC 中的位错运动有所增强。同时也观察到少量的 WC 晶粒通过局部转动来协调变形，如图 3 (d) 所示 WC 晶粒，其局部区域原子的位移矢量与其他区域明显不同，且二者之前存在晶格畸变区，如图 3 (c) 所示。当 WC 晶粒尺寸相对较小时，晶界和相界比例更高，且晶粒内部难以产生位错运动，此时 WC/WC 晶界的滑移或邻近 Co 粘结相的 WC 晶粒发生局部转动等微观运动加剧，界面发生应力集中，进而产生断裂的概率明显增加，因此超细和纳米晶硬质合金在摩擦过程中更容易发生 WC 颗粒的直接脱落。对于晶粒尺寸相对较大的硬质合金材料，如图 4 (a) 所示，WC 中位错的交互作用会在局部产生应力集中，导致晶粒开裂并逐渐破碎。

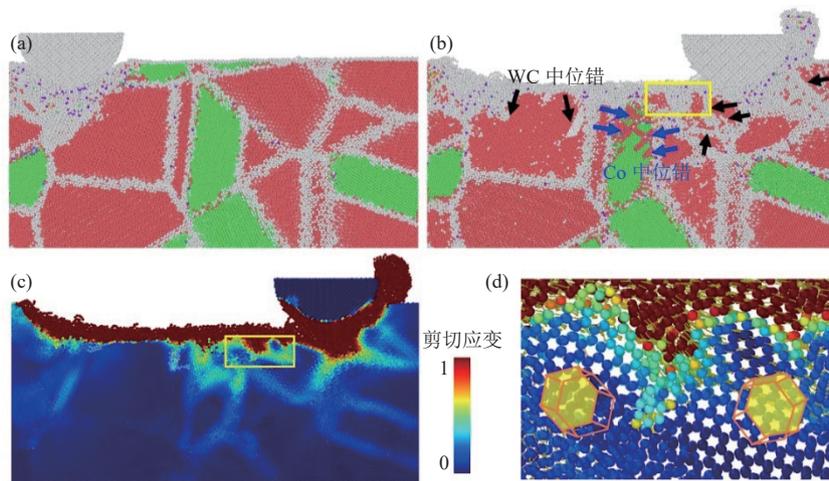


图 3 平均晶粒尺寸为 12 nm 的 WC-Co 硬质合金摩擦初始 (a) 和结束 (b) 的模拟组织以及摩擦结束后的剪切应变分布 (c) 和摩擦过程中 WC 晶粒的局部转动 (d)

Fig.3 Simulated microstructure of the WC-Co cemented carbides with the mean grain size of 12 nm at the beginning (a) and the end (b) of the friction process, the shear strain distribution at the end of friction (c), and the local rotation of WC grains during the friction process (d)

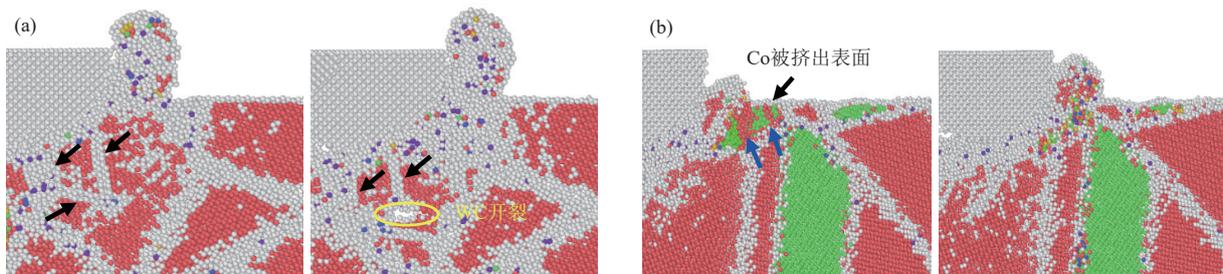


图 4 平均晶粒尺寸为 12 nm 的 WC-Co 硬质合金在摩擦时发生 WC 晶粒开裂 (a) 和 Co 粘结相挤出-去除的过程 (b)

Fig.4 Fracture of WC grains (a) and the extrusion-induced removal of the Co binder phases (b) during the friction process of the WC-Co cemented carbides with the mean grain size of 12 nm

如图 4 (b) 所示, Co 粘结相则会因较大程度的塑性变形被挤出表面, 然后在摩擦作用下被首先去除。上述模拟结果与宏观硬质合金材料在摩擦作用下的变形、失效行为一致<sup>[31-32]</sup>。

### 2.2 摩擦载荷的影响

在已有的相关模拟研究中, 晶体材料的磨损被定义为基体原子的转移<sup>[33]</sup>, 与其晶格参数有直接关系。对于 WC-Co 硬质合金, 其晶格内相邻原子间的最大距离约为 0.3 nm。现将表面位移超过 0.6 nm 且在 Z 轴方向上高于初始接触平面位置 (15 nm) 的原子个数定义为原子尺度的磨损量。

图 5 示出了晶粒尺寸分别为 5 nm 和 12 nm 的 WC-Co 硬质合金在 200、400 和 600 nN 的压力载荷下的磨损量随滑移距离的变化。两种晶粒尺寸的 WC-Co 硬质合金的磨损量均随滑移距离而近似线性增大。当压力载荷相对较大 (600 nN) 时, 两种合金的磨损量在滑移后期都迅速增长。如图 6 所示, 对于两种晶粒尺寸的合金, 当滑动摩擦距离达到 12.0 nm 时, 均可观察到亚表层的 Co 受挤压变形发生了沿 WC/WC 晶界向表面的移动, 这是由于在摩擦后期压头压入 WC-Co 合金中的深度和接触面积均增加, 因此在平均晶粒尺寸为 12 nm 的 WC-Co 合金中, Co 相上方的 WC 被拔出, 而与 Co 相邻的 WC 塌陷严重, 在剪切力作用下发生深度磨损, 造成磨损量迅速增加。相比较而言, 平均晶粒尺寸为 5 nm 时, 主要是由于 WC 晶粒转动而导致其邻近的 Co 粘结相出现严重的损伤, 进而造成磨损量的增加。可见, 当平均晶粒尺寸较小时, 摩擦变形过程中, WC 晶粒转动逐渐起主导作用, 如图 6 (b) 虚线框所示, 降低了由 WC 晶粒塑性

变形、断裂、破碎引起的多重因素的影响, 而 Co 粘结相因变形被挤出表面, 进而被摩擦去除的程度更低, 因此与平均晶粒尺寸为 12 nm 的合金相比, 磨损量有所下降。模拟结果证实, WC 晶粒尺寸较小的硬质合金在滑动磨损条件下具有更高的耐磨性。上述结果从微观尺度解释了前期通过实验研究得到的磨损规律, 即烧结 WC-Co 硬质合金的滑动磨损率随 WC 晶粒尺寸的增加而单调增加<sup>[32]</sup>。

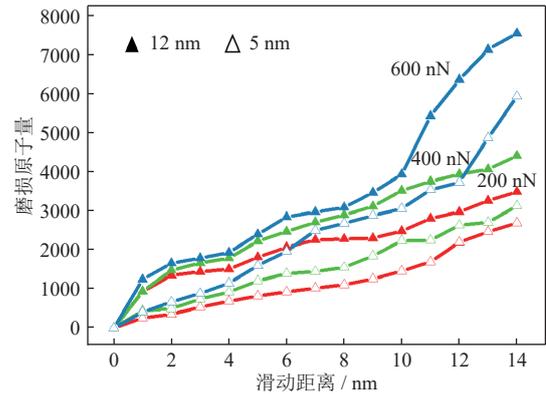


图 5 两种晶粒尺寸的 WC-Co 硬质合金在不同压力作用下磨损量随滑动距离的变化

Fig.5 Variation of the wear rate with the sliding distance for the WC-Co cemented carbides with two different grain sizes in the various pressure

图 7 示出了平均晶粒尺寸分别为 12 nm 和 5 nm 的 WC-Co 硬质合金在不同载荷下的剪切应变分布, 选取 200 nN 和 600 nN 进行对比分析。从图 7 (a) 和图 7 (b) 中可以看出, 对于平均晶粒尺寸为 12 nm 的 WC-Co 硬质合金, 在较低的载荷作用下, 较大的应变主要分布于试样表层区域, 而随着载荷的增

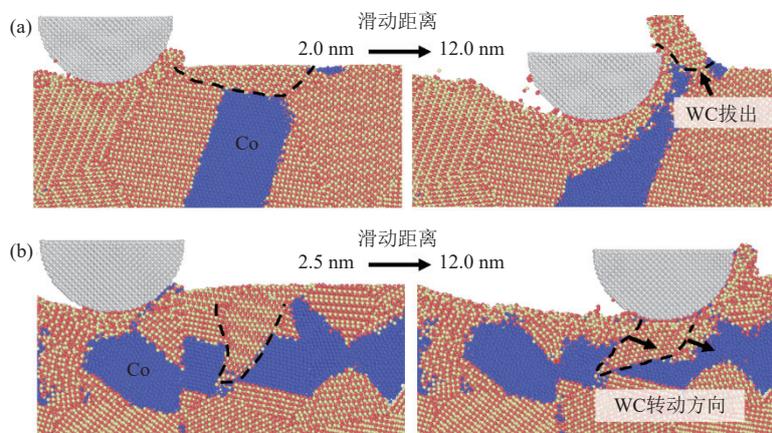


图 6 两种晶粒尺寸的 WC-Co 硬质合金在 600 nN 载荷下滑动摩擦不同距离时的组织结构: (a) 12 nm; (b) 5 nm

Fig.6 Microstructure of the WC-Co cemented carbides with two different grain sizes after the sliding friction at 600 nN in the various distance: (a) 12 nm; (b) 5 nm

大，在深表层区域，WC 晶粒和 Co 相均发生了显著的塑性变形，应变通过 Co 相在基体中传递的深度更大，相应可能造成的亚表层损伤程度更大。平均晶粒尺寸为 5 nm 时，如图 7 (c) 和图 7 (d) 所

示，即便摩擦载荷较低时，较大的应变也主要分布于晶界和相界，随着载荷的增加，应变通过界面向试样内部传递到更深的范围，与 12 nm 的 WC-Co 硬质合金在摩擦时有明显的不同的应变响应特征。

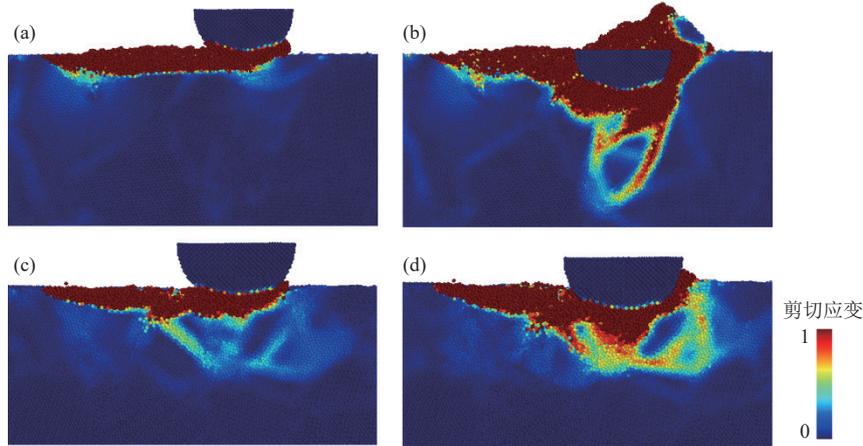


图 7 两种晶粒尺寸的 WC-Co 硬质合金在不同摩擦载荷作用下的剪切应变响应：(a) 12 nm，200 nN；(b) 12 nm，600 nN；(c) 5 nm，200 nN；(d) 5 nm，600 nN

Fig.7 Shear strain response of the WC-Co cemented carbides with two different grain sizes under the different frictional loads: (a) 12 nm, 200 nN; (b) 12 nm, 600 nN; (c) 5 nm, 200 nN; (d) 5 nm, 600 nN

### 2.3 滑动摩擦速率的影响

图 8 示出了平均晶粒尺寸分别为 12 nm 和 5 nm 的 WC-Co 硬质合金在 0.1~0.4 nm·ps<sup>-1</sup> 的滑动速率下的磨损率和损伤深度变化。关于滑动速率对磨损率的影响机理较少在实验研究中得到充分解释，这可能由于相关研究所使用的原子力显微镜在微观磨损实验中，难以测得因滑动速率改变而引起的微小磨损量变化所致<sup>[34]</sup>。分子动力学模拟结果显示，两种合金的磨损率和损伤深度均随着滑动速率的增加而降低；在相同的滑动速率下，WC-Co 硬质合金

的磨损率均随晶粒粗化而增加。对于晶粒尺寸较大的硬质合金，滑动速率加快，摩擦作用下 WC 晶粒和 Co 粘结相中的位错在较短的时间内难以充分扩展，使得摩擦区的塑性变形程度减小，诱发 WC 晶粒产生应力集中、破碎的程度明显降低；对于晶粒尺寸较小的硬质合金，滑动速率加快会使得晶体转动的程度显著降低，晶界和相界的破坏程度减小，从而使得损伤深度减小，同时磨损率也下降。

图 9 示出了晶粒尺寸分别为 5 nm 和 12 nm 的 WC-Co 硬质合金在 0.1 nm·ps<sup>-1</sup> 和 0.4 nm·ps<sup>-1</sup> 滑动

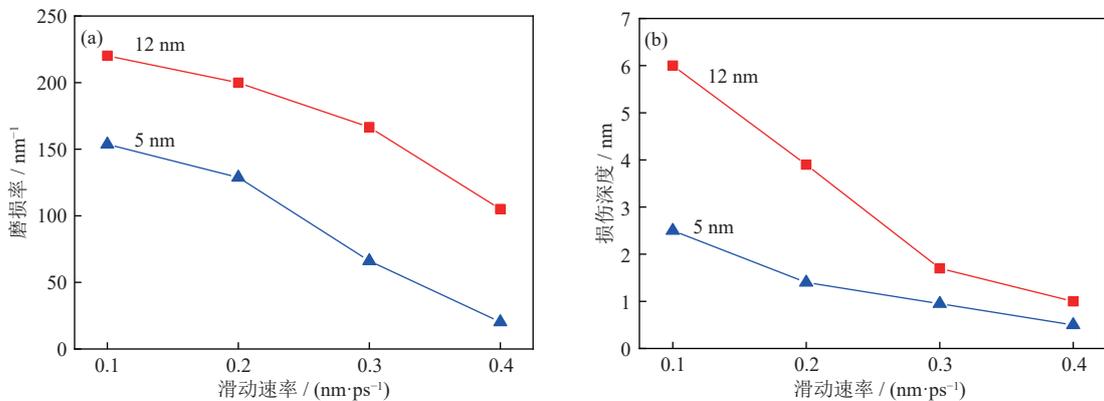


图 8 两种晶粒尺寸的 WC-Co 硬质合金在不同滑动速率作用下的磨损率 (a) 和损伤深度 (b) 变化

Fig.8 Variation of wear rate (a) and damage depth (b) with the sliding velocity for the WC-Co cemented carbides with two different grain sizes

速率下微观结构变化。对比图 9 (a) 和图 9 (b) 可知, 当晶粒尺寸较大、滑动速率较高时, WC-Co 硬质合金亚表层的位错形核率低, 已形核位错缺乏持续的驱动应力, 不能充分扩展, 在尚未贯穿整个晶粒前就已经发生湮灭, 导致亚表层的位错密度相对较低; 当滑动速率较低时, 亚表层的位错能够贯穿于整个 WC 晶粒, 并且位错组态相对稳定, 没有发生明显的位错湮灭, 而是残留在晶体内部成为亚表面变质层的一部分, 导致亚表面磨损深度增加。对比图 9 (c) 和图 9 (d) 可知, 当晶粒尺寸较小、

滑动速率较低时, 晶界有足够时间充分发挥塑性调节作用而释放摩擦应力, 可观察到晶粒转动程度更大 (如图 9 (c) 和图 9 (d) 中黄色矩形框所示), 而在晶界和相界面处产生了大量的未知结构的原子; 随着滑动速率增加, 晶粒发生旋转的程度减小, 晶界和相界面附近的无序原子数量相对减少, 亚表层 Co 中的缺陷密度明显更低 (如图 9 (c) 和图 9 (d) 中红色矩形框所示), Co 变形被挤出表面造成 WC 破碎脱落的程度显著下降, 从而使得其磨损率和损伤深度均降低。

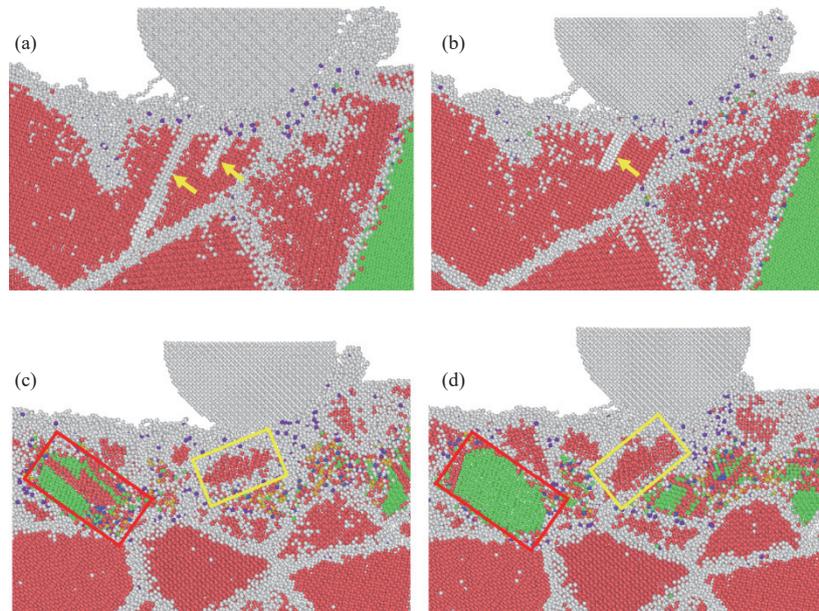


图 9 两种晶粒尺寸的 WC-Co 硬质合金在不同摩擦速率作用下的结构演变: (a) 12 nm,  $0.1 \text{ nm}\cdot\text{ps}^{-1}$ ; (b) 12 nm,  $0.4 \text{ nm}\cdot\text{ps}^{-1}$ ; (c) 5 nm,  $0.1 \text{ nm}\cdot\text{ps}^{-1}$ ; (d) 5 nm,  $0.4 \text{ nm}\cdot\text{ps}^{-1}$

Fig.9 Structural evolution of the WC-Co cemented carbides with two different grain sizes in the various sliding velocity: (a) 12 nm,  $0.1 \text{ nm}\cdot\text{ps}^{-1}$ ; (b) 12 nm,  $0.4 \text{ nm}\cdot\text{ps}^{-1}$ ; (c) 5 nm,  $0.1 \text{ nm}\cdot\text{ps}^{-1}$ ; (d) 5 nm,  $0.4 \text{ nm}\cdot\text{ps}^{-1}$

### 3 结论

(1) 当 WC 晶粒尺寸较小时, 晶粒转动、晶界变形和少量 Co 相中的位错滑移是硬质合金在摩擦过程中的主要塑性变形机制, 随晶粒尺寸增大, Co 相和 WC 中位错滑移逐渐起主导作用。

(2) 摩擦载荷增大导致硬质合金滑动磨损速率显著升高, 这是因为易发生塑性变形的 Co 粘结相会被挤出表面而首先去除, 并导致 WC 的拔出。因此, 针对滑动磨损工况, 利用合适的制备方法细化硬质合金的晶粒尺寸、强化 Co 相, 可以抑制 Co 粘结相的挤出-磨损机制, 进而提高其抗滑动磨损性能。

(3) 滑动速率增大, WC-Co 硬质合金的磨损

速率有所降低, 其原因是在高速滑动过程中, 亚表层各相中位错的形核扩展缺乏持续的驱动应力, 位错密度低, WC 不易发生断裂, 因 Co 粘结相被挤出表面而造成的磨损程度明显减轻。

### 参考文献

- [1] Ghasali E, Orooji Y, Tahamtan H, et al. The effects of metallic additives on the microstructure and mechanical properties of WC-Co cermets prepared by microwave sintering. *Ceram Int*, 2020, 46(18): 29199
- [2] Ezquerro B L, Lozada L, van den Berg H, et al. Comparison of the thermal shock resistance of WC based cemented carbides with Co and Co-Ni-Cr based binders. *Int J Refract Met Hard Mater*, 2018, 72: 89
- [3] Tang Y. Research progress on preparation of cobalt-less/cobalt-free WC-based materials. *Powder Metall Technol*, 2021, 39(3): 280  
(唐愈. 少钴/无钴 WC 材料制备研究进展. 粉末冶金技术, 2021,

- 39(3): 280)
- [4] Li C, Li N, Liu X Q, et al. Effect of WC mass fraction on the microstructure and properties of Ti(C<sub>0.7</sub>N<sub>0.3</sub>)-based cermets. *Powder Metall Technol*, 2018, 36(2): 100  
(李朝, 李楠, 柳学全, 等. WC质量分数对Ti(C<sub>0.7</sub>N<sub>0.3</sub>)基金属陶瓷组织和性能的影响. 粉末冶金技术, 2018, 36(2): 100)
- [5] Yin S, Ekoi E J, Lupton T L, et al. Cold spraying of WC-Co-Ni coatings using porous WC-17Co powders: Formation mechanism, microstructure characterization and tribological performance. *Mater Des*, 2017, 126: 305
- [6] Derelizade K, Venturi F, Wellman R G, et al. Wear performance of graphene nano platelets incorporated WC-Co coatings deposited by hybrid high velocity oxy fuel thermal spray. *Wear*, 2021, 482: 203974
- [7] Erfanmanesh M, Shoja-Razavi R, Abdollah-Pour H, et al. Friction and wear behavior of laser clad WC-Co and Ni/WC-Co deposits at high temperature. *Int J Refract Met Hard Mater*, 2019, 81: 137
- [8] Geng Z, Li S, Duan D L, et al. Wear behaviour of WC-Co HVOF coatings at different temperatures in air and argon. *Wear*, 2015, 330: 348
- [9] Liu Y L, Zhu S Y, Yu Y, et al. Wear mechanism, tribological and anti-oxidation properties of Al doped WC-Co hardmetals under high temperature. *Tribology*, 2019, 39(5): 565  
(刘育林, 朱圣宇, 于源, 等. 铝掺杂WC-Co基硬质合金的高温摩擦学性能、磨损机理及抗氧化性能研究. 摩擦学学报, 2019, 39(5): 565)
- [10] Babu P S, Basu B, Sundararajan G. Abrasive wear behavior of detonation sprayed WC-12Co coatings: influence of decarburization and abrasive characteristics. *Wear*, 2010, 268(11-12): 1387
- [11] Yin B, Zhou H D, Yi D L, et al. Microsliding wear behaviour of HVOF sprayed conventional and nanostructured WC-12Co coatings at elevated temperatures. *Surf Eng*, 2010, 26(6): 469
- [12] Gee M G, Gant A, Roebuck B. Wear mechanisms in abrasion and erosion of WC/Co and related hardmetals. *Wear*, 2007, 263(1-6): 137
- [13] Engqvist H, Högberg H, Botton G A, et al. Tribofilm formation on cemented carbides in dry sliding conformal contact. *Wear*, 2000, 239(2): 219
- [14] Tkalich D, Kane A, Saai A, et al. Wear of cemented tungsten carbide percussive drill-bit inserts: Laboratory and field study. *Wear*, 2017, 386: 106
- [15] Wang D F, Ma B, Ma L C, et al. Effect of WC grain size on the microstructure and mechanical properties of HVOF-sprayed WC-10Co4Cr coatings. *Powder Metall Technol*, 2019, 37(6): 434  
(王大锋, 马冰, 马良超, 等. WC颗粒尺寸对超音速火焰喷涂WC-10Co4Cr涂层组织及力学性能的影响. 粉末冶金技术, 2019, 37(6): 434)
- [16] Bonny K, De Baets P, Perez Y, et al. Friction and wear characteristics of WC-Co cemented carbides in dry reciprocating sliding contact. *Wear*, 2010, 268: 1504
- [17] Hezaveh T, Moazami-Goudarzi M, Kazemi A. Effects of GNP on the mechanical properties and sliding wear of WC-10wt% Co cemented carbide. *Ceram Int*, 2021, 47(13): 18020
- [18] Srivastava I, Kotia A, Ghosh S K, et al. Recent advances of molecular dynamics simulations in nanotribology. *J Mol Liq*, 2021, 335: 116154
- [19] Jiao Z, Song C B, Lin T S, et al. Molecular dynamics simulation of the effect of surface roughness and pore on linear friction welding between Ni and Al. *Comput Mater Sci*, 2011, 50(12): 3385
- [20] Song C B, Lin T S, He P, et al. Molecular dynamics simulation of linear friction welding between dissimilar Ti-based alloys. *Comput Mater Sci*, 2014, 83: 35
- [21] Xie H C, Ma Z C, Zhao H W, et al. Temperature induced nano-scratch responses of  $\gamma$ -TiAl alloys revealed via molecular dynamics simulation. *Mater Today Commun*, 2022, 30: 103072
- [22] Yuan R, Li P, Chen L, et al. Effects of grafting oxygen atoms on the tribological properties of graphene: Molecular dynamics simulation and experimental analysis. *Appl Surf Sci*, 2020, 528: 147045
- [23] Lin J M, Jiang F, Wen Q L, et al. Deformation anisotropy of nano-scratching on C-plane of sapphire: A molecular dynamics study and experiment. *Appl Surf Sci*, 2021, 546: 149091
- [24] Wang G Q, Zhao G, Song J F, et al. Effect of velocity and interference depth on the tribological properties of alumina sliding with Cu: A molecular dynamics simulation. *Chem Phys Lett*, 2021, 775: 138669
- [25] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool. *Modell Simul Mater Sci Eng*, 2009, 18(1): 015012
- [26] Abbaspour M, Akbarzadeh H. Accurate melting temperatures for Ne nanoclusters and bulk from an effective two-body potential via molecular dynamics simulations. *Fluid Phase Equilib*, 2014, 381: 90
- [27] Matuszek J, Moczala A. The modelling and simulation method in computer aided cooperation. *Control and Cybern*, 2010, 39(1): 117
- [28] Wu L J, Wang W, Lu J B, et al. Study of the interfacial adhesion properties of a novel self-healable siloxane polymer material via molecular dynamics simulation. *Appl Surf Sci*, 2022, 583: 152471
- [29] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *J Comput Phys*, 1995, 117: 1
- [30] Zhang Q H, Mortazavi B, Zhuang X Y, et al. Exploring the mechanical properties of two-dimensional carbon-nitride polymer nanocomposites by molecular dynamics simulations. *Compos Struct*, 2022, 281: 115004
- [31] Gee M, Mingard K, Nunn J, et al. *In situ* scratch testing and abrasion simulation of WC/Co. *Int J Refract Met Hard Mater*, 2017, 62: 192
- [32] Wang H B, Gee M, Qiu Q F, et al. Grain size effect on wear resistance of WC-Co cemented carbides under different tribological conditions. *J Mater Sci Technol*, 2019, 35(11): 2435
- [33] Bai L C, Srikanth N, Korznikova E A, et al. Wear and friction between smooth or rough diamond-like carbon films and diamond tips. *Wear*, 2017, 372: 12
- [34] Hauert R. An overview on the tribological behavior of diamond-like carbon in technical and medical applications. *Tribol Int*, 2004, 37(11-12): 991