

---

# 研究为TiN涂层环境演化规律构建统一性微观理论

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/32532.html>

**本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！**

研究为TiN涂层环境演化规律构建统一性微观理论。氮化钛（TiN）拥有优异的结构稳定性、力学强度与耐磨性、抗环境腐蚀/氧化、生物兼容性等特点，在海洋/高温材料、核电、生物医药、光电子器件等领域被广泛用作结构/功能性涂层。这些应用普遍涉及各类氧化/腐蚀性的气体/溶液环境，TiN涂层的服役稳定性也极大取决于表面结构与环境介质（比如O<sub>2</sub>和H<sub>2</sub>O）之间的复杂微观耦合作用。但是，TiN表面服役行为是一种多场耦合的反应过程，多种内/外因素（比如表面形貌/组分、环境条件和历史等）的协同作用使得几十年来各式各样的实验观测现象缺乏清晰统一的理解。这极大限制了人们精准研发更多新型涂层的能力，从而无法有效满足极端苛刻环境下的材料保护需求。

中国科学院宁波材料技术与工程研究所海洋关键材料重点实验室王立平研究员、原子尺度与微纳制造实验室曹彦伟研究员、前沿交叉科学研究中心黄良锋研究员等带领的多个团队紧密合作，并联合了中国科学技术大学理化科学实验中心葛敏高级工程师和甬江实验室萧绍铸副研究员，在原子尺度级别上为TiN表面的环境演化规律成功构建了可靠的统一性微观理论。研究人员基于高精度、多性能、多尺度的第一性原理计算方法，结合热力学、动力学、电化学理论模型，以及先进的涂层制备（单晶和多晶纳米薄膜）和表征技术（HR-XRD、ARPES、SEM、STEM-HAADF、EDX等），系统研究了三类表面结构的本征稳定性、环境物质反应行为和表面钝化/腐蚀趋势。所得到的数值结果和机理图像不仅统一解释了几十年来众多实验观测现象，也成功指导了实验合作者开展深入的表面本征态测量、强酸/碱腐蚀测试和微结构表征工作。

本工作为许多TiN基涂层及类似氮化物涂层环境服役性能的有效调控和精准预测提供了可靠的原理依据。该项研究成果以Unifying the atomistic trends for early-stage evolution of TiN surfaces in atmospheric and aqueous environments为题，发表在国际冶金顶级期刊《材料学报》上（Acta Materialia 2025, 289, 120909）。宁波材料所2022级硕士生周游麒为第一作者，宁波材料所2022级硕士生郭章媛为共同第一作者，通讯作者为宁波材料所博士后毕佳畅、王立平研究员、黄良锋研究员。该研究获国家自然科学基金项目（U21A20127、22272192、12204495）等的资助。（来源：中国科学院宁波材料技术与工程研究所）

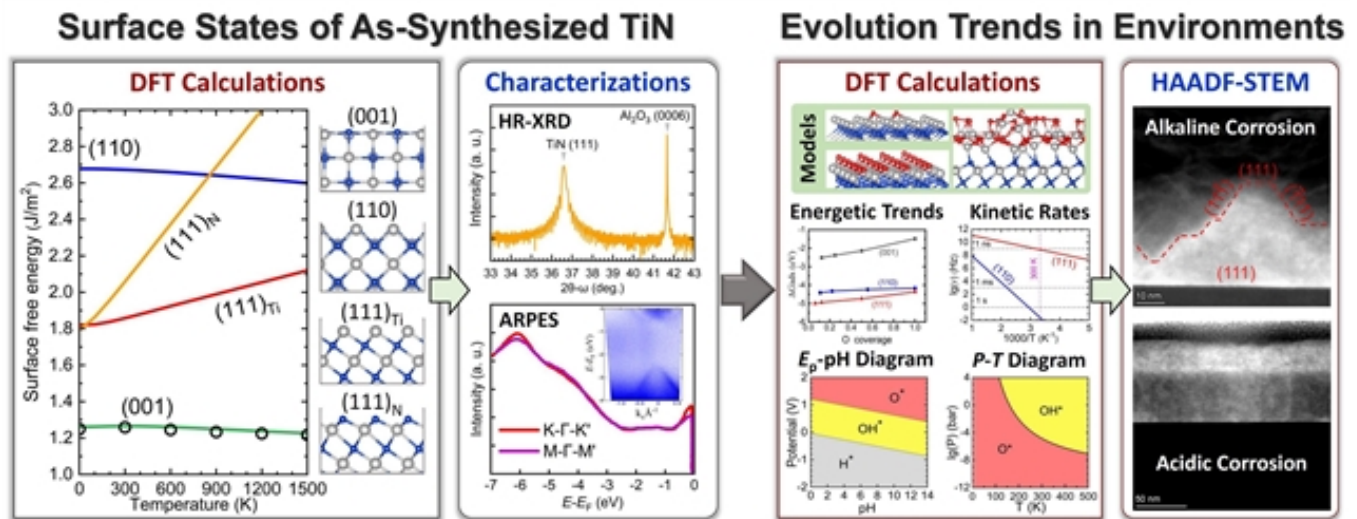


图1 氮化钛涂层表面在制备条件和实际服役环境中演化规律的理论计算和实验验证

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2025.120909>

作者：王立平等 来源：《材料学报》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发