

基于分子动力学模拟研究温度对 TiN 在纯钛中的扩散行为的影响

郭清远^{1,2}, 王文焱^{1,2}, 谢敬佩^{1,2}, 许伟春³, 刘正红³, 王丽娟³, 王磊³, 秦文栋^{1,2}

1. 河南科技大学材料科学与工程学院, 河南 洛阳 471023;

2. 有色金属新材料与先进加工技术省部共建协同创新中心, 河南 洛阳 471023;

3. 洛阳双瑞万基钛业有限责任公司, 河南 洛阳 471832)

摘 要: 本研究基于分子动力学模拟方法, 探究氮化钛作为扩散介质时, 氮原子在纯钛(α -Ti)基体中的扩散行为。定量计算温度对 N 原子扩散速率、扩散路径及扩散产物结构的调控机制。通过原子运动轨迹重构与空间分布统计, 直观呈现了 N 原子沿 α -Ti 的迁移路径; 利用径向分布函数和原子数密度分布分析, 表征扩散产物的短程有序结构及浓度梯度演变, 明确温度对 TiN 在纯钛中的扩散行为影响。结果表明: 扩散过程中 TiN/Ti 界面处 N 原子首先开动, Ti-N 键断裂。扩散产物以 Ti₂N 为主、存在少量 Ti₃N。扩散行为主要发生在 1200 K 以上, 900 K 以下时仅有少量 N 扩散到 α -Ti 结构间隙中, TiN 结构维持相对稳定, 1200 K 以上时随着温度的升高 N 原子扩散速率呈指数级增加。1200 K 时 N 原子扩散系数为 $2.5 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$, N 原子在 TiN/Ti 界面处的扩散激活能为 0.39 eV。加工过程中温度低于 900 K 可有效弱化 TiN 夹杂中 N 元素扩散造成的影响。

关键词: 分子动力学; 温度; N 扩散行为; TiN 夹杂

A study on the effect of temperature on the diffusion behavior of TiN in pure titanium using molecular dynamics simulation

Abstract: This study had employed molecular dynamics (MD) simulations to investigate the diffusion behavior of nitrogen atoms in a pure titanium (α -Ti) matrix when titanium nitride (TiN) acted as the diffusion medium. Quantitative calculations had been performed to reveal the regulatory mechanisms of temperature on the diffusion rate, migration paths, and structural characteristics of the diffusion products. The migration pathways of nitrogen atoms along the α -Ti lattice had been intuitively reconstructed through atomic trajectory analysis and spatial distribution statistics. The short-range order and concentration gradient evolution of the diffusion products had been characterized using the radial distribution function (RDF) and atomic number density distribution. These analyses had clarified the influence of temperature on the diffusion behavior of TiN in pure titanium. The results show that nitrogen atoms at the TiN/Ti interface are initially activated during diffusion, accompanied by the breaking of Ti-N bonds. The main diffusion product is Ti₂N, with a small amount of Ti₃N also present. Significant diffusion occurs primarily above 1200 K, while below 900 K, only a limited number of nitrogen atoms diffuse into the interstitial sites of the α -Ti structure, and the TiN phase remains relatively stable. Above 1200 K, the diffusion rate of nitrogen atoms increases exponentially with temperature. At 1200 K, the diffusion coefficient of nitrogen atoms reaches $2.5 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$, and the diffusion activation energy at the TiN/Ti interface is 0.39 eV. Maintaining the processing temperature below 900 K can effectively mitigate the impact caused by nitrogen diffusion from TiN inclusions.

Keywords: Molecular Dynamics; TiN; Diffusion Coefficient; Diffusion Activation Energy

海绵钛是一种通过镁或钠还原四氯化钛制得的高纯度钛, 是生产钛材及其合金的基础原料。广泛应用于航空航天和海洋、化学品、电气和电子、医

疗、能源等领域^[14-16], Research nester 在 2024 年三月给出的海绵钛市场规模的预测报告中指出预计到 2036 年底, 海绵钛市场规模将达到 39 亿美元, 年

增长率为3.5%。2023年,全球海绵钛产业规模为26亿美元。

然而生产过程中引入的氮化物杂质会对钛材的性能产生较大的影响。会使钛合金出现的脆性增加,影响其高温性能,延展性,加工困难,表面质量下降,疲劳寿命缩短^{[27][28]}等一系列的问题。吴施质等^[1]制备了内部含有硬质 α 夹杂(TiN)缺陷的TC4钛合金试验件,并开展了低循环疲劳试验,随着N含量的增加,TC4钛合金的疲劳寿命明显降低,硬质 α 夹杂的存在使得合金内部易萌生裂纹,且断口为脆性断裂。Gao等^[8]人研究了氮含量对高钛镍基高温合金FGH96微观结构和疲劳裂纹扩展速率的影响,在真空感应熔炼炉制备FGH96合金,然后在不同真空下进行电渣重熔(ESR)。在高氮含量合金的横截面中,裂纹扩展路径上观察到了TiN氮化物的存在,TiN尖锐的形状会在基体中产生较大的应力集中。当含氮量由66 ppm降至12 ppm时,合金的微观结构几乎没有变化,但疲劳裂纹扩展速率显著降低。

李文刚等^[9]研究了微量氮元素对纯钛显微组织及力学性能的影响,用真空电弧熔炼炉制备了5种不同质量分数的钛氮合金,氮含量小于0.3%,在晶界处形成的主要是TiN_{0.3}化合物,氮含量为0.3%时,晶界和晶内开始出现Ti₂N化合物。氮元素含量的增加会使得合金的伸长率下降,并且断裂方式由韧性断裂转变为脆性断裂。Malihe等^[10]在纯氮气中约3到4个标准大气压,1000 K左右对工业纯钛进行氮化。得到的渗氮层组织由外到内为TiN、Ti₂N、TiN_{0.3}组成的氮化层,在更深层的钛基体形成含氮的 α -Ti固溶体。J.P. BELLOT^[11]采用电子束冷床熔炼(EBM)和等离子弧熔炼(PAM)等多种工艺研究了硬 α 夹杂物在液态钛合金中的溶解,TiN夹杂的溶解过程是N通过 β -Ti相层进入钛基体熔池,TiN夹杂并未完全溶解,EBM和PAM工艺对硬 α 夹杂物的去除效果更好。

分子动力学能够分析大量原子之间相互作用,被广泛应用与包括原子迁移扩散,拉伸切削,表面沉积等模拟过程。Sangiovanni^[12]通过分子动力学模拟研究了氮化钛表面的Ti原子吸附扩散,在微正则系综下使用MEAM势函数,结果表明在17×17个TiN晶胞的面积上Ti原子的进行跳跃的扩散激活能是最小的,并给出了吸附Ti的扩散系数随温度的变化关系。马清源^[13]构建了钛、氮原子在TiN(001)表面上进行薄膜沉积的MD模型,研究Ti、N原子以一定角度入射到TiN基表面,结果表明当沉积原子

的入射能量较高时,薄膜的表面粗糙度较低;在入射能量较低时,TiN薄膜呈岛状生长,而入射能量较高时则呈层状生长。

本文采用NVT系综,运用2NN MEAM势函数研究TiN中的N原子在不同温度下的扩散行为,在真空条件不考虑压力的情况下采用周期性边界条件模拟镁热还原法实际生产中生成的氮化物在钛基体中的扩散。旨在为减少钛材中N元素含量,生产高质量钛材提供理论依据。

1 模型建立与势函数验证

1.1 模型结构

本文运用Atomsk软件建立初始HCP-Ti、FCC-TiN晶胞,对建立的HCP-Ti初始晶胞进行扩胞并正交化,模型如图1-1所示, x 、 y 、 z 三个方向均采用周期性边界条件,模拟实际的扩散过程。模型区域的整体尺寸为72.08 Å×72.08 Å×72.08 Å,外部为密排六方结构的Ti原子,外部Ti原子尺寸略小于模拟区域,为70.80 Å×71.53 Å×70.20 Å,目的是使得填充弛豫后的模型的预应力得以消除。中心部分填充一个半径10 Å的面心立方结构TiN球体,TiN的晶格常数 $a_1(a_1=0.424\text{ nm})$,Ti的晶格常数 $a_2(a_2=0.295\text{ nm})$ 、 $c_2(c_2=0.468\text{ nm})$,模型中Ti层的 x 、 y 、 z 轴晶向分别为 $[1\bar{1}00]$ 、 $[11\bar{2}0]$ 和 $[0001]$,TiN层的 x 、 y 、 z 轴晶向分别为 $[11\bar{2}]$ 、 $[\bar{1}10]$ 和 $[111]$,模型一共由20170个原子组成,中心填充的FCC-TiN结构中共有276个原子,运动方程采用verlet法进行数值积分,原子初始速度由麦克斯韦速率分布给出,时间步长设置为0.001ps。扩散模拟中使用是Kim^[3]提出的Ti-N二元体系的2NN MEAM势函数,改进型嵌入原子势(MEAM)是Baskes^[2]在嵌入原子势(EAM)的基础上对原子间的键的方向性进行改进使其适用于共价键体系,考虑了最近邻原子之间的相互作用。而Kim修正的Ti-N体系2NN MEAM势函数补充了次近邻原子作用力,对氮化钛析出物与基体、位错或其他缺陷之间相互作用也具有适用性,更加适用于氮化钛中的氮原子在钛基体中的扩散行为的预测^[24]。2NN MEAM势已广泛应用于约20种元素的结构、热力学性质及力学性质的研究,包含单质中的金属键及二元化合物的共价键的相互作用,适用于FCC、BCC、HCP等多种结构的金属单质及化合物。Kim^[3]运用2NN MEAM势计算所得的Ti-N、Ti-C间的界面能与第一性原理结果相符,体模量、热线性膨胀、熔点等数据与实验值

相近。扩散模拟过程采用 NVT 系综, 压强为 0 Pa, 采用 Nose-Hoover 热浴法调节体系温度, 不引入随机力, 使得系统严格遵循正则系综。对模型各部分在 300 K 下进行 50 ps 的弛豫后组合。设置系统的初始温度为扩散过程中的保温温度 (600 K、900 K、1200 K、1500 K、1800 K、), 在恒温扩散前, 进行 50 ps 的弛豫保证填充后各部分原子之间不重叠且各部分结构不会受到破坏, 模型的各部分组合较好, 各部分压力均匀。进行 300 ps 恒温扩散, 研究填充的 TiN 中 N 原子在纯钛中的扩散行为。

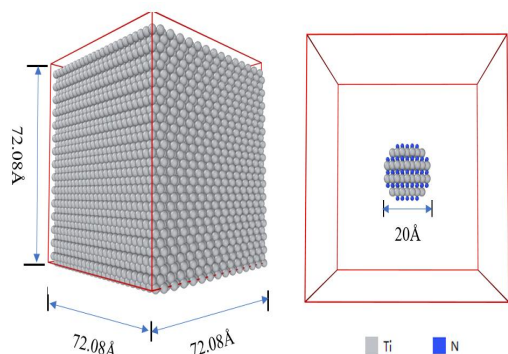


图 2-1 模型的初始结构

Fig. 2-1 The initial configuration of the model

1.2 势函数验证

势函数是分子动力学模拟准确性的关键, 在模拟开始前需要对所用势函数进行验证。本文所用的是 2NN MEAM 势函数, 将 Ti 模型在室温下弛豫后, 在 NPT 系综下进行模拟升温速率为 8500 K/ps, 从 300 K 升温至 2000 K, 输出的 Ti 原子平均体积随温度变化的数据如图 2-2 所示, 升温过程中 Ti 原子平均体积在 1924 K 前均匀变化, 在 1924 K 出现体积突变, 到达 Ti 的熔点。

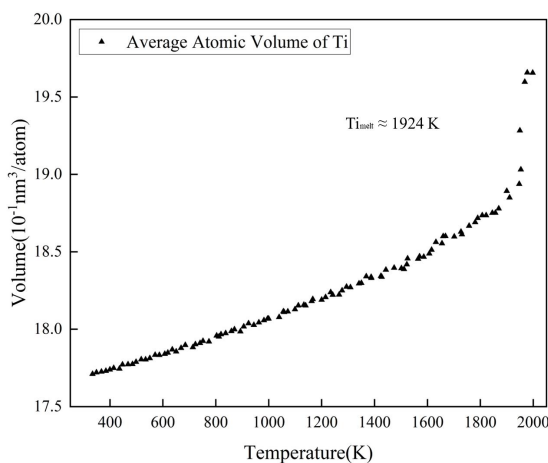


图 2-2 Ti 平均原子体积随温度的变化

Figure 2-2 Variation of the Average Atomic Volume of Ti with Temperature

2 结果与分析

2.1 原子运动轨迹分析

图 2-3 为不同温度下扩散 300 ps 后 N、Ti 原子的扩散轨迹, 清晰的展示了部分 Ti、N 原子扩散后在基体中的分布情况, 由图 2-2 可知在 600 K 进行 300 ps 的扩散后中心的球体 TiN 的结构已被破坏, 内部的 Ti、N 原子都有小幅度的热运动, 而外部钛基体中的 Ti 原子仍保持原有的密排六方结构。扩散过程主要以 TiN 中的 N 原子向钛基体的各个方向扩散为主。

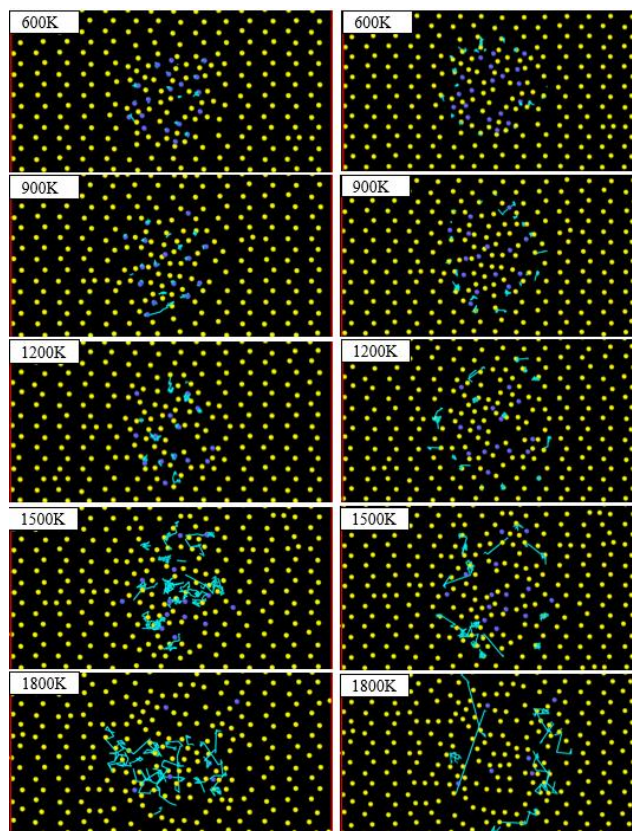


图 2-3 不同温度下 N/Ti 原子运动轨迹

Figure 2-3 Atomic Trajectories of N/Ti Atoms at Different Temperatures

Prince Gollapalli^[4]等人利用第一性原理密度泛函理论 (DFT) 的研究表明在氮化钛中, 氮空位的形成能远高于钛中氮间隙原子的形成能。由于这一能量差异, 氮从氮化钛向钛的扩散在热力学上是有利的。具体来说, 氮空位的形成使氮可以从氮化钛扩散至钛, 从而降低钛-氮化钛异质结构的内能。随着氮的扩散, 直到部分氮从氮化钛转移到钛基体中, 形成原子级化学渐变的三维界面^[4]。在纯氮气氛围中渗氮 8 h 的实验中渗氮温度一般低于 900 K, 能够得到稳定的渗氮结构, 在此温度以上进行渗氮会使渗层出现开裂的现象。在 1200 K 以下的扩散过程中

球体内的 Ti、N 原子的基本上都在平衡位置附近的空位内进行运动, 仅有与 Ti 基体接触的 N 原子由于 TiN/Ti 界面处的空位形成能差首先开动^[4], 进入 Ti 基体内部, 依据 Sangiovanni^[12]对 Ti 原子在 TiN 晶面上的吸附扩散的研究推测首先开动的 N 原子位于 Ti、N 原子的四重空心点位上能量较低的位置^[5]。随着 TiN 结构中界面处的 N 的开动, 原有的 TiN 结构被破坏, 导致原 TiN 结构中 Ti 原子的运动而外部基体 Ti 原子仍保持 HCP 结构。

2.2 Ti、N 原子扩散 MSD 分析

图 2-4 为 1200 K 恒温扩散 300 ps 三个方向上 Ti、N 原子均方根位移, 此模拟构建的晶体结构规

则, 球形 TiN 中 N 原子向 x 、 y 、 z 三个方向扩散的趋势大致相同。图 2-5 为不同温度下 Ti、N 原子均方根位移随时间变化曲线, 整体上看 N 原子的 MSD 远大于 Ti 原子说明扩散过程主要是球形 TiN 中 N 原子向 Ti 基体的迁移为主。在 900 K 以下的恒温扩散过程中, Ti、N 原子的 MSD 增加趋势不明显, 此温度下原子所具有的能量不足以使其冲破势垒扩散到另一个空位中。MSD 在 900 K 到 1200 K 之间时发生突变, 与钛的相变温度有关, 较大范围的 N 原子的扩散发生 1200 K 以上。TiN/Ti 界面处 Ti 基体一侧的空位形成能为负值, TiN 侧的 N 原子向能量较低的 Ti 基体侧的空位运动^[4]。

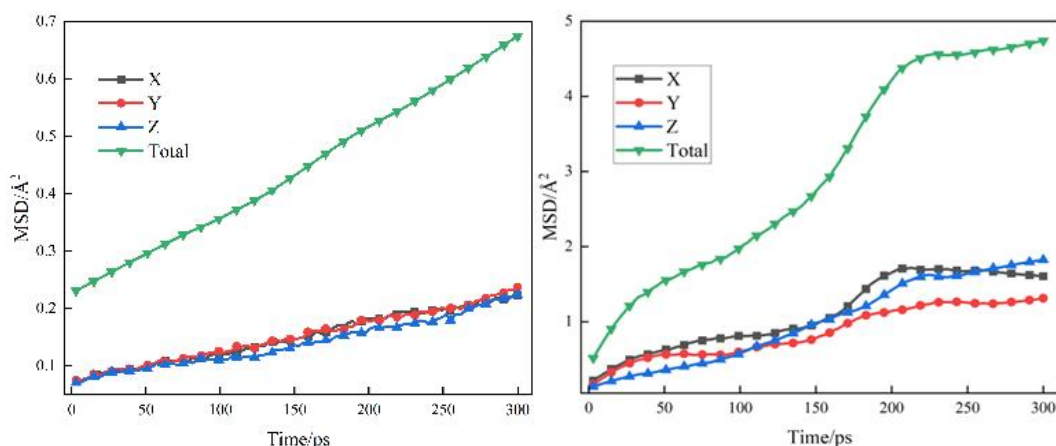


图 2-4 1200K 恒温扩散 300ps 三个方向上 Ti、N 原子均方根位移

Figure 2-4 Root Mean Square Displacement of Ti and N Atoms along Three Directions during 300 ps Diffusion at a Constant Temperature of 1200 K

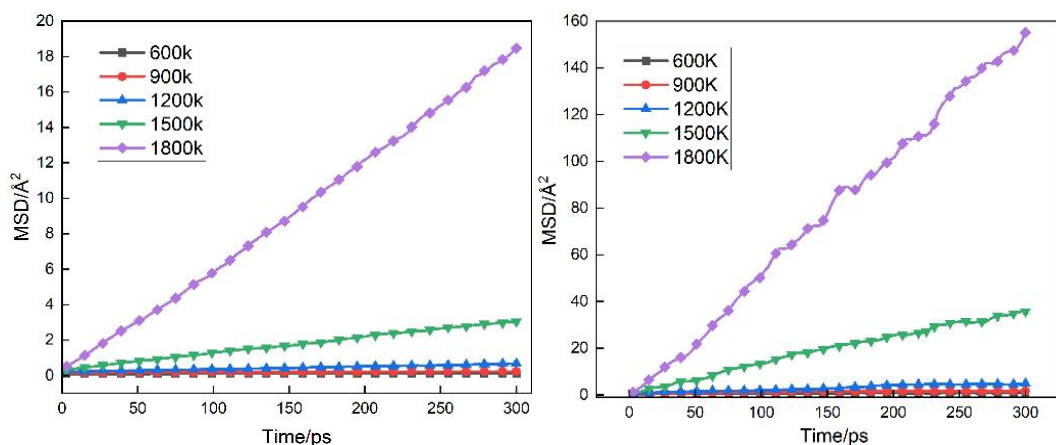


图 2-5 不同温度下 Ti、N 原子均方根位移随时间变化曲线

Figure 2-5 Time Dependence of the Root Mean Square Displacement of Ti and N Atoms at Different Temperatures

2.3 扩散系数分析

爱因斯坦揭示了扩散现象与布朗运动间的关系, 随机运动的粒子移动距离的平方与时间成正比。均方根位移对时间求一阶导可得原子的扩散系数^[23]。

此模型主要用于研究 TiN 中 N 在钛基体中扩散行为, 且根据 2.2 中钛原子的 MSD 曲线可以推测

Ti 基体结构相对稳定, 因此主要计算 N 的扩散系数。在 HCP-Ti 结构的 P6/mmm 空间群中, 存在两个不同的 Ti 空间位点, 第一个位点中钛原子与十四其他钛原子结合, 呈现 14 配位结构。其中, 两条较短的 Ti-Ti 键长为 2.83 Å, 十二条较长的 Ti-Ti 键长为 2.99 Å。第二个位点中钛原子与十一个其他钛原子

结合, 较短的 Ti-Ti 键长为 2.64 Å, 较长的 Ti-Ti 键长为 2.83 Å^[6]。在 FCC-Ti 结构的 Fm3m 空间群中, Ti 与十二个相同 Ti 原子结合, 所有 Ti-Ti 键长度为 2.91 Å^[7]。TiN 及 Ti₂N 结构的 Ti-N 键长分别为 2.12 Å 和 2.08 Å, Ti₃N 结构的 Ti-N 键长为 2.61 Å。TiN 表 2-1、图 2-6 为不同温度下 N 原子的扩散系数, 可以看出在 900 K 以下 300 ps 恒温扩散中 N 原子的扩散系数较小。在 1200 K 以上时 N 原子的扩散系数随温度的升高有较大的突变趋势, TiN 中靠近 Ti 基体的 Ti-N 断裂且之前进入 Ti 基体的 N 原子对后续扩散的 N 的阻碍作用减小。1200 K 时扩散系数为 $2.5 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ 。此模拟中 1800 K 下计算所得 TiN 中 N 原子在 Ti 基体中的扩散系数为 $8.7 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ 。Daniel Hawker^[18]和 Xu^[19]都采用数值模拟与实验结合的方法研究了 TiN 夹杂在液态钛中的溶解情况, 并给出了 N 原子在液态中扩散的经验公式, 根据他们给出的经验公式计算在约 1941 K 时扩散系数分别为 $0.43 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ 和 $51.3 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ 。而 J.P. BELLOT^[20]通过 TiN 在纯钛中溶解实验计算所得的扩散系数为 $0.145 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ 。经验公式中还给出氮了在 β -Ti 中的扩散系数公式^[21]在 1800 K 下约为 $1.963 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ 。

表 2-1 不同温度下 N 原子的扩散系数
Table 2-1 Diffusion Coefficient of N Atoms at Different Temperatures

Temperature/K	Diffusioncoefficient(Å ² /ps)
600	0.00028
900	0.000718
1200	0.002557
1500	0.019608
1800	0.087615

2.4 径向分布函数分析

径向分布函数 (RDF) 用来描述一个原子周围一定范围内出现其他的原子概率, 可以用来表征结构的有序程度^{[25][26]}。此模拟中计算了不同温度下恒温扩散 300 ps 后 Ti-N 之间的径向分布函数与 Ti₂N、Ti₃N 的径向分布函数进行对比。不同温度下扩散 300 ps 后的 RDF 如图 2-7 所示, 不同温度下 Ti-N 之间的 RDF 的趋势基本一致, 但在不同原子出现的概率 $g(r)$ 值与半展峰宽上存在差别。随着温度的升高 $g(r)$ 值变小而半展峰宽有变宽的趋势说明 N 原子在 Ti 基体中的分布出现了变化, 脱离了完美晶格结构的位点, 体系的晶格畸变程度增大。温度较高时 Ti 原子周围出现 N 原子的概率变小, 说明扩散较为均匀。且由 Ti-N 键较强峰的位置可知扩散后形成的钛氮化物键长在 2.08 Å 左右, 且随温度的升高峰强呈现减小的趋势。与计算出的 Ti₂N、Ti₃N 中 Ti-N 的 RDF 进行对比后发现与 Ti₂N 中 Ti-N 键长相同, 2.68 Å 时的峰较弱。因此 TiN 在 Ti 基体中扩散后生成的氮化物中以 Ti₂N 为主、Ti₃N 量较少。

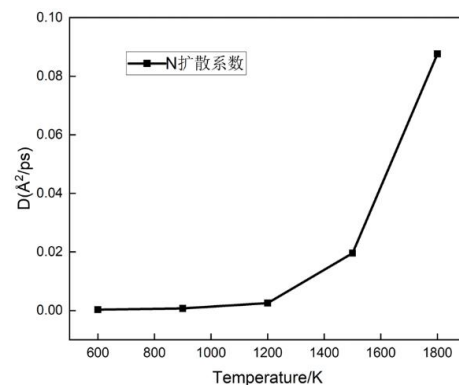


图 2-6 TiN 中的 N 在钛基体中的扩散系数 D
Figure 2-6 Diffusion Coefficient (D) of Nitrogen (N) in Titanium Nitride (TiN) within a Titanium Matrix

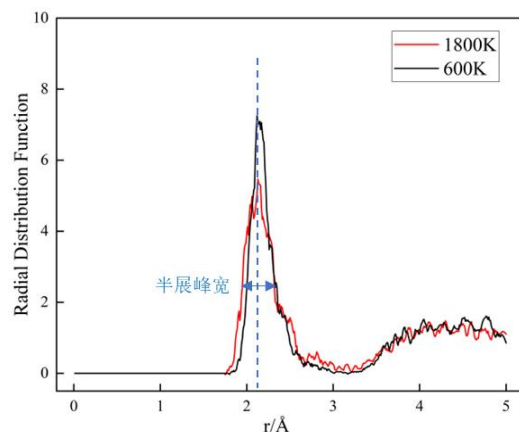
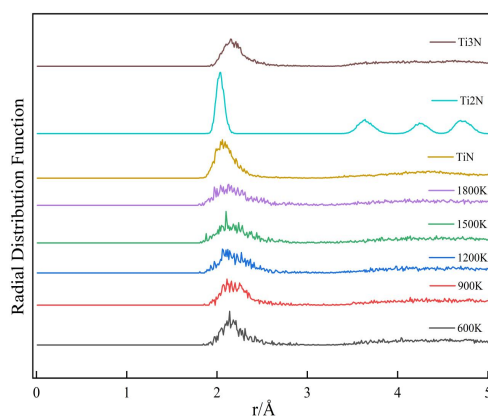


图 2-7 不同温度下 Ti、N 原子间的径向分布函数

Figure 2-7 Radial Distribution Function (RDF) between Ti and N Atoms at Different Temperatures

2.5 扩散激活能分析

活化能 Activation energy 是指分子从常态转变为容易发生化学反应的活跃状态所需要的能量。阿伦尼乌斯公式给出了反应速率与温度之间的定量关系。数学表达形式为:

$$\ln D = -\frac{E_a}{RT} + \ln A \quad (\text{公式 2-2})$$

式中: A 指前因子, R 为气体常数, E_a 为反应活化能, T 热力学温度。

对 Arrhenius 方程取对数, 可以得到扩散系数与 $1/T$ 之间的线性关系^[22], TiN 中 N 原子在 Ti 基体中的扩散激活能 E_a 如表 2-2 所示。在 900 K 以下的反应过程中, 外部 Ti 原子为 HCP 结构。当 $T_1=600$ K 和 $T_2=900$ K 处于低温区时, 此时的扩散激活能 E_a 较小, 扩散系数 D 的增幅较大。这是因为在低温区, 反应速率较低, 因此温度升高时, 扩散系数 D 的增幅会更加显著, 反应速率的变化较大。前半段 900-1200 K 时 D 的变化较大, 与 Ti 的相变点有关。 $T_3=1500$ K 和 $T_4=1800$ K 处于高温区, 扩散系数 D 增长的倍数相对较小, 反应速率常数已经接近饱和或增加的幅度受限于其他因素 (如反应物浓度等)。此时的扩散激活能 E_a 值较大, 此变化趋势与表 2-2 的计算值相同。

2.6 沿 z 轴方向上的原子数密度分布

利用 lammmps 的 chunk/atom 命令将模型沿 Z 轴方向分为 250 个近邻, 图 2-8 给出了不同温度下扩散 300 ps 后 Ti、N 原子沿 X 轴方向的原子数密度分布, TiN 中 N 在不同温度下的扩散情况。随着温度的升高, N 原子在 X 轴上的分布范围变宽, 外部钛基体中的 N 原子浓度逐渐增大, 在 1500 K 时, 在第 125 到 160 的近邻中 $\rho(\text{Ti}): \rho(\text{N}) \approx 2: 1$, 原有的 TiN 结构已被破坏。

表 2-2 不同温度下 N 原子扩散激活能与温度的关系

Table 2-2 Relationship Between the Diffusion Activation Energy of N Atoms and Temperature at Different Temperatures

$T(\text{K})$	$\ln D$	$E(\text{eV})$
600-900	-7.23858	0.15

900-1200	-5.96905	0.39
1200-1500	-3.9318	1.05
1500-1800	-2.4348	1.16

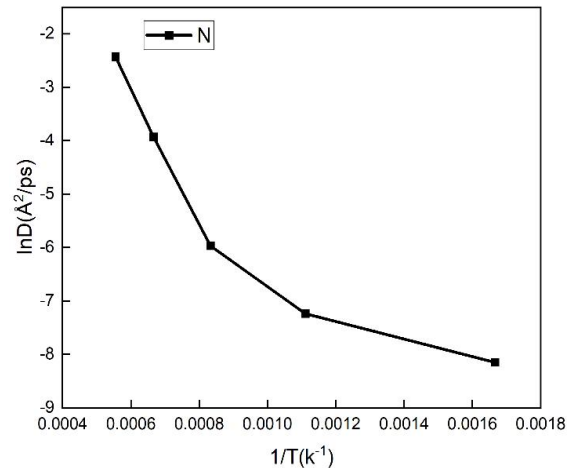


图 2-8 N 原子扩散系数的 Arrhenius 关系

Figure 2-8 Arrhenius Relationship of the Diffusion Coefficient of N Atoms

3 结论

(1) 在 Ti-N 界面处, 主要以 N 原子的扩散迁移为主, 通过对 Ti、N 原子沿 X 轴方向的数密度分布、径向分布函数 RDF 进行计算, 扩散后形成的钛氮化物键长基本都在 2.1 Å 左右, 随温度的升高峰强度下降。TiN 在钛基体中扩散后主要的产物为 Ti_2N 和少量 Ti_3N 。

(2) 温度是影响 N 在钛基体扩散的重要因素, 以 TiN 为介质的 N 扩散行为主要发生在 1200 K 以上, 1200 K 时扩散系数为 $2.5 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$, 扩散激活能为 0.39 eV。1200 K 以上 N 原子在 α -Ti 中的扩散速率呈指数级增加。

(3) 900 K 以下时, TiN 在钛基体中结构保持相对稳定, N 原子仅在平衡位点附近震荡, 对 Ti 基体的影响程度很小, 钛材在此温度以下加工能够弱化 TiN 夹杂中因 N 元素扩散造成的影响。

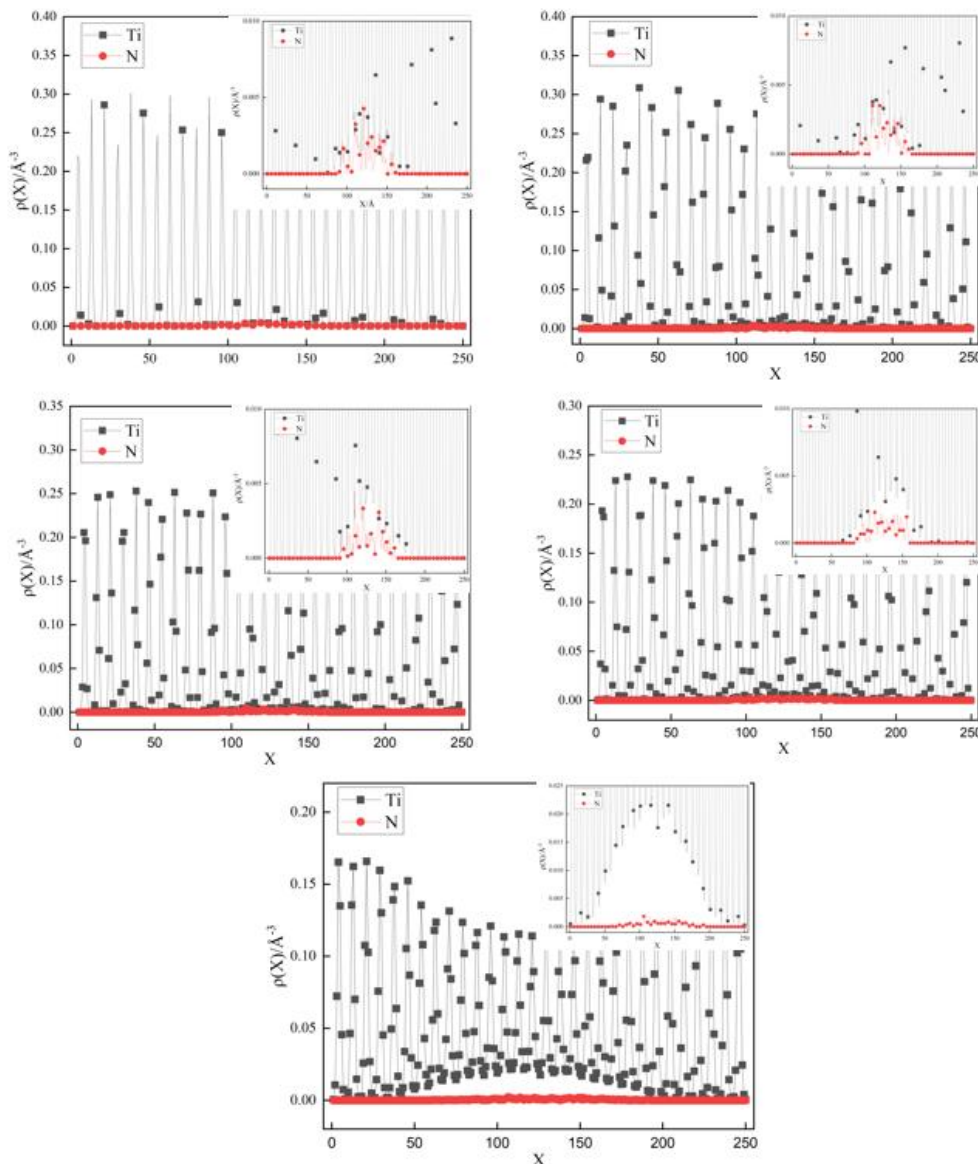


图 2-9 不同温度下沿 X 轴方向原子的数密度分布

Figure 2-9 Atomic Number Density Distribution along the X-axis at Different Temperatures

参考文献:

- [1] 吴施志,王建方,石建成,等.内置硬质 α 缺陷的 TC4 疲劳寿命试验研究 [J]. 热加工工艺,2023,52(10):48-52.DOI:10.14158/j.cnki.1001-3814.20221590.
- [2] Baskes M I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities[J]. Physical review B, 1992, 46(5): 2727.
- [3] 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.
- [4] Gollapalli, Prince, et al. "Atomically chemically graded Ti/TiN interface." Applied Surface Science 597 (2022): 153637.
- [5] Sangiovanni, D. G., et al. "Ti adatom diffusion on TiN (001): Ab initio and classical molecular dynamics simulations." Surface science 627 (2014): 34-41.
- [6] E.S. Chebotareva and S.G. Nuzhdina. Observation of omega-titanium in a composite hard facing alloy based on fine-grain diamonds. Fizika Metallov i Metallovedenie, 36:200 - 202, 1973.
- [7] Wang Xin Quan and Wang Jian Tao. Structural stability and hydrogen diffusion in ti hx alloys. Solid State Communications, 150:1715 - 1718, 2010.
- [8] Gao, xiaoyong, et al. "Effect of nitrogen content on microstructure and fatigue crack growth rate of high titanium-alloyed superalloy." Materials Characterization 167 (2020): 110492.
- [9] 李文刚,炊鹏飞,冯甜,等.微量氮元素对纯钛显微组织及

- 力学性能的影响[J].材料热处理学报,2022,43(09):49-57.DOI:10.13289/j.issn.1009-6264.2022-0089.
- [10] Mohammadi, Malihe, et al. "Depth profiling characterization of the nitride layers on gas nitrided commercially pure titanium." *Materials Characterization* 181 (2021): 111453.
- [11] Bellot, J. P., et al. "Dissolution of hard-alpha inclusions in liquid titanium alloys." *Metallurgical and Materials transactions B* 28 (1997): 1001-1010.
- [12] Sangiovanni, D. G., et al. "Ti adatom diffusion on TiN (001): Ab initio and classical molecular dynamics simulations." *Surface science* 627 (2014): 34-41.
- [13] 马清源. TiN 薄膜沉积行为及其性能的分子动力学研究[D]. 山东 东 大 学, 2022. DOI:10.27272/d.cnki.gshdu.2022.002931.
- [14] Haile, Fitsum, Jill Adkins, and Marco Corradi. "A review of the use of titanium for reinforcement of masonry structures." *Materials* 15.13 (2022): 4561.
- [15] Wu, X., Wang, H., & Wang, Y. (2023). A Review: Synthesis and Applications of Titanium Sub-Oxides. *Materials*, 16(21), 6874.
- [16] Melo-Fonseca, F., et al. "Surface characterization of titanium-based substrates for orthopaedic applications." *Materials Characterization* 177 (2021): 111161.
- [17] Li, Zhaolong, et al. "Progress, applications, and perspectives of titanium-based braze filler metal: a review." *Journal of Materials Science* 58.38 (2023): 14945-14996.
- [18] Hawker, Daniel, et al. "Numerical modeling of the diffusional transport of nitrogen in multi-phase solid titanium and its application to determine diffusion coefficients." *Journal of Materials Research and Technology* 14 (2021): 1089-1098.数值模拟
- [19] Xu, Jixiang, et al. "Dissolution of Ti-N inclusions in liquid titanium during electron beam melting." *Journal of Materials Research and Technology* 17 (2022): 1522-1539.
- [20] Bellot, J. P., et al. "Dissolution of hard-alpha inclusions in liquid titanium alloys." *Metallurgical and Materials transactions B* 28 (1997): 1001-1010.
- [21] Ou, Jun, et al. "An examination of the factors influencing the melting of solid titanium in liquid titanium." *International Journal of Heat and Mass Transfer* 86 (2015): 221-233.
- [22] 毛爱霞. 基于分子动力学的 Cu/Al 层状复合板界面结构的模拟研究 [D]. 郑 州 大 学, 2021. DOI:10.27466/d.cnki.gzzdu.2021.005388.
- [23] 崔云峰, 王文焱, 谢敬佩, 等. 分子动力学分析 Cu/Al₂Cu/Al 体系的扩散过程[J].材料热处理学报,2023,44(11):167-175.DOI:10.13289/j.issn.1009-6264.2023-0136.
- [24] 柳培. Ti₂AlN/TiAl 相界面模型及变形机理的原子尺度研究 [D]. 哈 尔 滨 工 业 大 学, 2019. DOI:10.27061/d.cnki.ghgdu.2019.000532.
- [25] Ji, X. (2022). Diffusion model of Lennard-Jones fluids based on the radial distribution function. *The Journal of Physical Chemistry B*, 126(44), 9008-9015.
- [26] 林雪, 于美杰, 王成国, 等. 原子径向分布函数在材料结构研究中的应用[J].材料导报,2012,26(03):116-119+143.
- [27] 王金龙, 彭文杰, 冀秀坤, 等. 不同类型表面粗糙度对钛合金疲劳失效影响的试验研究[J/OL].哈尔滨工程大学学报,2025,(05):1-8[2025-01-16].
- [28] 李文桔, 张慧霞, 张宏泉, 等. 温度对钛合金应力腐蚀行为的影响[J].中国腐蚀与防护学报,2023,43(01):111-118.