

“基于团簇理论的薄膜成分设计”

专题序言

随着表面技术的发展和市场需求的增加，薄膜材料正在从传统的金属碳氮化物以及碳膜走向更加丰富的材料种类，材料设计也逐步与薄膜工艺相结合，薄膜精细设计与制备的新时代已经到来。为此本刊邀请了大连交通大学董闯教授和大连理工大学李晓娜副教授作为联合主编，编辑了薄膜材料成分设计专题，突出展示该课题组发展的基于团簇式的薄膜成分设计理论。

金属和无机材料中，化学键在空间呈连续分布，不存在弱的分子键，因此没有传统意义上的分子作为成分载体，这构成材料成分设计的核心难点。而根据团簇式理论，材料的成分载体为化学近程序结构单元，具有类似于分子的电中性和平均原子密度的特性，且该单元仅覆盖第一近邻配位多面体团簇以及若干次近邻连接原子，可用“团簇加连接原子”的团簇式描述。

团簇式方法实现了从原子到组织设计的跨越，已经实用于不锈钢、铜合金、钛合金、高熵合金、金属玻璃、多元陶瓷等各种材料的成分优化。本专题收集的九篇论文聚焦于团簇式设计方法在薄膜材料成分设计上的应用，涵盖的领域包括燃料电池双极板涂层、高稳定性导电铜合金薄膜、非晶及准晶合金以及氧化物透明导电膜等。

本期专题为研究人员提供了薄膜材料成分设计的实用方法，应用实例可作为相关行业的参考。

专题主编：

董闯 李晓娜