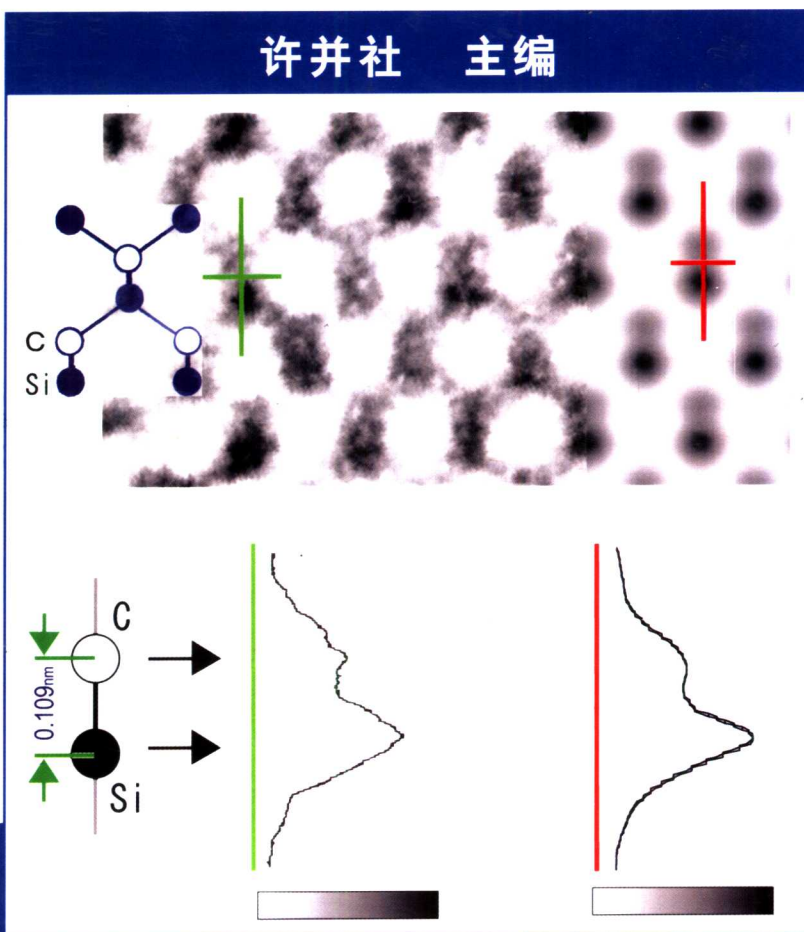


材料界面的 物理与化学

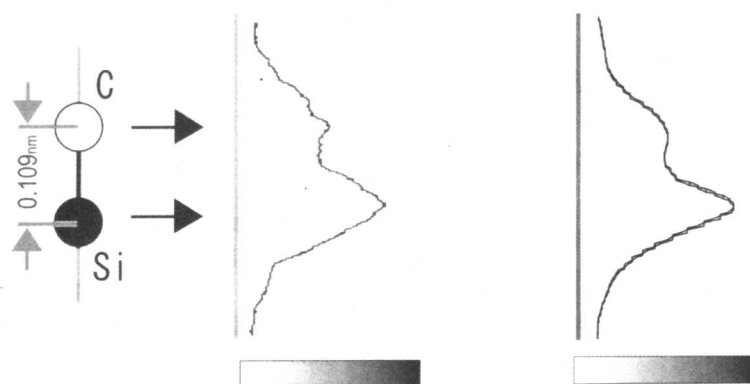
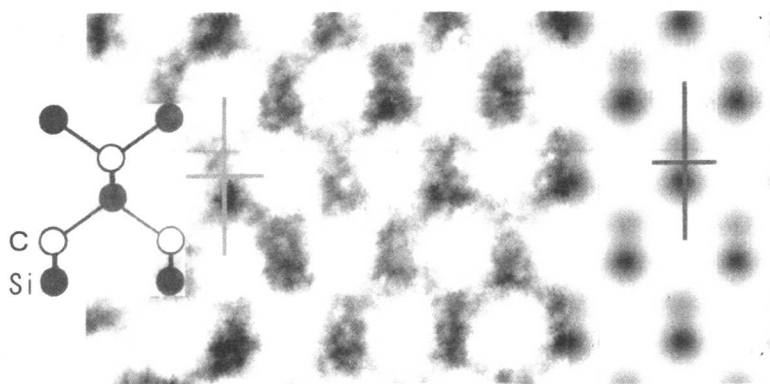
许并社 主编



化学工业出版社

材料界面的 物理与化学

许并社 主编



化学工业出版社

· 北京 ·

本书简要介绍了各种材料的连接方法与设备;分析了材料界面形成过程中的物理与化学现象;重点讨论了材料界面的形成机理、分析方法、模拟设计、界面控制和影响材料性能的各种因素,并结合近年材料学界的最新研究成果,对材料界面研究中的难点、热点和焦点问题及未来材料的发展方向进行了描述。本书可供从事凝聚态物理、材料科学与工程、冶金、电子、机械和化学化工研究的科研人员、高等院校相关专业的研究人员和师生阅读和参考。

图书在版编目(CIP)数据

材料界面的物理与化学/许并社主编. —北京:化学工业出版社, 2006. 4

ISBN 7-5025-8559-1

I. 材… II. 许… III. ①材料-界面-表面物理
②材料-界面-表面化学 IV. TB30

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 037174 号

材料界面的物理与化学

许并社 主编

责任编辑:靳星瑞 梁虹

责任校对:蒋宇

封面设计:九九设计工作室

*

化学工业出版社出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

购书咨询:(010)64982530

(010)64918013

购书传真:(010)64982630

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

大厂聚鑫印刷有限责任公司印刷

三河市万龙印装有限公司装订

开本 720mm×1000mm 1/16 印张 32½ 字数 573 千字

2006 年 5 月第 1 版 2006 年 5 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-8559-1

定价:68.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者,本社发行部负责退换

前 言

近些年来,随着对钢铁材料、镁铝材料、陶瓷材料、半导体材料、电子材料及纳米级新材料和复合材料等研究的不断深入发展,材料界面之作用日趋增加。材料界面直接影响着材料的物理、化学、力学等性能与应用范围。分析材料界面的物理与化学过程、物质传输、能量转化及研究材料界面的结构与性能间的关系,对研究新材料和传统材料及其应用有着愈来愈重要的意义。

为此,世界范围内研究材料特别是研究新材料的专家们召开了数次各层次的会议,也发表了许多论述材料界面诸现象的论文。我们把基础理论与实际工程材料界面问题融合在一起,对它们按相关专业、相同方向归纳、整理;按材料界面的制作、检测、分析、计算、模拟设计等关键的过程为序进行了论述和编著。

全书共分4篇11章。绪论简要综述了国内外材料界面研究动态与发展前景,第一篇重点论述了材料界面的基础知识、界面的形成过程、制备技术和该过程的物理与化学反应;第二篇在简要介绍材料界面的传统分析方法和现代分析方法的基础上,重点举例分析介绍了分析技术的应用和近年来的科技成果;第三篇以收录的科技成果为例,说明材料界面的设计、模拟、控制、制作过程中的基础理论、分析方法和应用技术;第四篇简要叙述了材料界面的力学行为等评价方法。

本书由许并社主编(全书统稿)、王社斌副主编(完成第一篇第一章、第二篇第七章、第三篇第九章),李晋敏(第一篇第二、三、四章,第四篇第十、十一章),卫英慧(第三篇第九章第五节)、郭端阳(第三篇第八章)、韩培德(绪论)等共同完成。由于作者知识有限,加之该领域发展很快,存在许多不足之处甚至缺点和错误,恳请读者不吝赐教。

本书在编辑过程中,得到了“新材料界面科学与工程”省部共建教育部重点实验室的梁伟、胡兰青、李健、梁建、王晓敏、贾虎生、刘旭光、陆路、李明照、张金玲等人的大力协助。特别是得到了朱静院士、李方华院士、叶恒强院士、黄孝瑛等专家的斧正。出版工作得到了“国家自然科学基金”(50471070)、国家“973”项目“我国重油高效利用的基础研究”(2004CB217808)的支持,封面图片由市野濂英喜提供,

在此敬致诚挚的感谢。借出版之机，谨向鼓励、关心和支持本书出版的同仁和工作人员表示衷心的感谢。

太原理工大学

新材料界面科学与工程省部共建教育部重点实验室

许并社

2006年3月于太原

目 录

绪论	1
第一篇 材料界面	13
第一章 晶体界面的基础知识	13
第一节 晶体晶粒的几何学理论	13
第二节 材料界面结构	28
第三节 晶界与界面的化学组成解析	45
第四节 各种晶体界面的结构与性质	58
第二章 材料界面形成过程	95
第一节 表面能与界面能	95
第二节 分子轨道模型	100
第三节 硅化合物的表面问题	101
第四节 金属-合金的表面张力与黏着功的关系	106
第五节 浸润与物理性质间的关系	110
第六节 陶瓷的表面能	115
第三章 材料界面的制备技术	125
第一节 材料界面的制备方法	125
第二节 材料界面中的物理与化学问题	145
第三节 异质材料界面中的中间相(层)	164
第四章 材料界面形成过程的物理化学反应	174
第一节 氧化物与各种金属元素的相容性	174
第二节 接合界面中的反应	177
第三节 陶瓷与金属·合金的反应及浸润性	181
参考文献	251
第二篇 材料界面的检测与分析方法	276
第五章 传统的材料界面检测技术	276

第一节	薄膜黏附强度与剥离试验	276
第二节	反射测定	276
第三节	声波检测	277
第四节	断口辐射	278
第五节	阻抗光谱	279
第六节	俄歇光谱 (AES)	279
第七节	接合界面上微量元素行为的确认	279
第八节	扩散接合部位的光声显微镜无损检测	281
第九节	用超声波确认陶瓷的表面缺陷	281
第六章	传统的异相界面的热应力测定	282
第一节	热应力测定方式简介	282
第二节	热应力的分布	286
第七章	现代的表面·界面分析技术	294
第一节	电子束分析	294
第二节	用低能电子衍射法分析	314
第三节	电子能量损失分光分析	323
第四节	离子射线分析	333
第五节	STM 分析	345
第六节	AFM 分析	364
第七节	发射光解析	371
参考文献		378
第三篇	材料界面的设计与控制论	386
第八章	晶体界面的行为与物理·化学诸现象	386
第一节	晶界的移动与滑移	386
第二节	晶界的塑性变形	391
第三节	晶界的破坏 (熔融金属的脆性)	396
第四节	界面的导电性	403
第五节	界面的热应力与松弛	408
第六节	材料物性中晶格变形的非线性成分	415
第九章	材料界面的设计与控制实例	419
第一节	金属积层晶格	419
第二节	纳米晶体材料	424

第三节	纤维强化材料.....	434
第四节	不同材料的接合.....	437
第五节	材料界面研究实例.....	443
参考文献		486

第四篇 材料界面的力学行为评价..... 497

第十章	材料界面的接合强度与失效.....	497
第一节	材料界面的破坏.....	497
第二节	材料界面的力学研究特点.....	499
第十一章	材料界面的评估.....	504
第一节	材料界面的强度评价.....	504
第二节	材料界面的非破坏检查.....	507
参考文献		511

绪 论

表面与界面是材料物理、化学性质发生空间突变的二维区域，是材料中普遍存在的结构组成单元。材料的物理性能（如电磁性能、光学性能）、力学性能（如强度、塑性、断裂韧性）以及化学、电化学性能（如偏聚、氧化与腐蚀等）均与材料的界面（包括晶界、相界、表面）有着非常密切的关系。材料的很多破坏和失效也首先起源于表面和界面，如加载后力的传递，在电磁场中电子的输运、在环境作用下的腐蚀等，都不可避免地通过表面、界面与基体的相互作用进行。复合材料从微米层次向亚微米层次甚至纳米层次推进、微电子与光电子器件集成度日益增高、纳米材料与纳米技术发展的迫切需要，使表面与界面科学的重要性更加突出，成为当代十分活跃的前沿领域。研究表面和界面的显微结构和其周围环境的相互作用以及与表面和界面相关的物理化学现象，对控制材料表面的物理化学过程、改变材料的表面性能以及相关的材料性能无疑是至关重要的。今天，人们比过去任何时候都更加注意界面研究在材料科学中的重要地位，表面与界面的研究不仅对推动当前材料研究是必需的，它还还为发展下一代新型材料提供了重要的基础^[1,2]。

国际上关于界面的研究始于 20 世纪^[3]，当时人们就发现钢中的粗晶粒能使钢变脆，界面的结构影响钢的性能。到 20 世纪 30 年代末 40 年代初，开始了界面模型的研究，成功地建立了重合位置点阵、O 点阵模型和结构单元等具有代表性的晶界几何模型，用来定量描述晶界的几何性质，但还难以对晶界的原子结构做出正确的描述。近十多年来，由于高性能、高分辨分析测试技术的不断完善以及高性能电子计算机技术的发展，使得直接观测表面和界面原子分布成为可能，并已获得很大的成功，如加深了两部分晶体间的界面一定存在周期性的认识，肯定了位错及其他缺陷对晶界行为的作用，使界面研究摆脱了以前纯界面模型研究的范畴。

一、界面的类型与研究内容

界面一词的意义是“物体与物体之间的接触面”，也称为两种物质（同种或不同种）之间的接触面、连接层和分界层。自然界中的物质一般都具有气相、液相和固相三种状态。按每两种相接触生成的界面分类有：液体-气体界面；液体-液体界面（限于两相液体基本不互溶时）；固体-气体界面；

固体-液体界面以及固体-固体界面这五种类型界面。两种气体相接触时，由于气体分子的相互运动，会很快混合在一起而成为由混合气体组成的一个气相，所以不存在气体/气体的界面。图 1 为三种状态物质之间形成的界面形式，其中固体/气体、液体/气体之间的分界面通常称为固体表面、液体表面；液体/液体为乳浊液；同质材料形成的固体/固体界面为晶界，异质材料形成的固体/固体界面为相界。

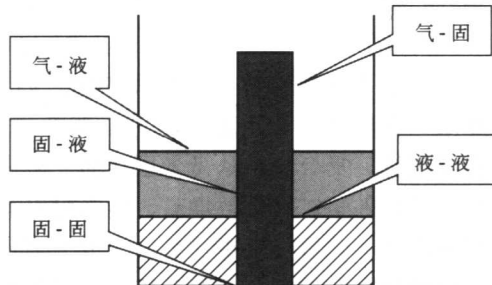


图 1 气相、液相、固相之间形成的界面

根据界面的连接紧密程度，界面连接有两种情况：物质之间无相互渗透和物质之间有相互渗透，如图 2 (a) 无相互渗透情况，即界面上 A、B 只是紧挨在一起，从微观角度看，A 中没有 B 的原子存在，B 中也没有 A 的原子存在，这种情况称为 A 和 B 无相互渗透连接；图 2 (b) 为有相互渗透情况，即在界面层内 A、B 共同存在，从微观角度看，A 中有 B 的原子存在，B 中也有 A 的原子存在，这种情况称为 A 和 B 相互渗透连接，连接处就会存在分子间相互作用，形成在组成、密度、性质上和两相有交错并有梯度变化的过渡区域。此分界层也可称为界面层。与两边相实体不同，它有独立的相，占有一定的空间，有固定的位置，有相当的厚度和面积，不过它的厚度是很小的，通常只有零点几纳米到几纳米。界面层虽然是独立存在的，但和两边的相有依存关系：凡是有两相接触的地方，就会有界面出现；反之，没有两相的接触，就不可能产生界面。

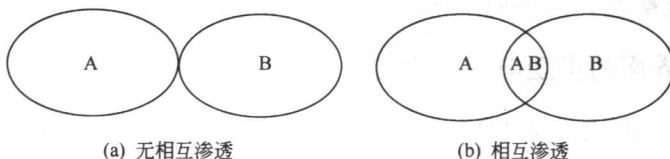


图 2 界面的连接

自然界中存在着大量与界面有关的现象，不同界面所表现出来的现象不

同。这些不同现象中,界面在其中起特别重要的作用,如^[4,5]下所述。

气-液界面:蒸发——部分液相分子在一定温度下转变为气相分子;蒸馏——液体分子蒸发后,部分气相分子冷凝转变为液相分子;表面张力——液相与气相之间界面所特有的一种力;泡沫——液体与气体不互溶时,气体分散在液膜内的一种常见的现象。

液-液界面:乳液——两不互溶液体相互接触时,一相的微滴分散在另一相的液体中,微滴对光线发生漫反射;界面张力——不互溶的两相液体接触界面上所特有的一种力。

气/固界面:气体吸附——吸附剂吸附气体的一种作用;气蚀——如气轮机的叶片,长期受喷射气体的冲刷所发生的腐蚀;升华——固体直接气化的现象;灰尘——固体的微粒悬浮于空气中;催化反应——气体与固体催化剂表面接触,在一定的条件下产生化学变化,生成新的化学物质;固体的分解——一种固体在一定条件下分解得到另一种固体和气体的现象,如碳酸钙加热分解成氧化钙和二氧化碳;气体和固体的化学反应,如空气中的氧气与铝的表面发生氧化反应生成氧化铝。

液-固界面:电解——电极浸入电解液中通直流电后,发生的电解反应;高分子胶体——聚合物的微粒分散在水或其他液体介质中,形成的胶体溶液;焊接——如熔融的焊锡(液体)焊接金属(焊锡焊接冷却后则是固/固界面);润湿——液体在固体表面上铺展开来;接触角——液滴在固体平面上形成的夹角;浮选——某些矿石粉末的有效成分在水溶液中上浮而达到富集矿石的有效成分的效果;润滑——如机油滴在齿轮间减小摩擦阻力的作用;催化——液体在固体催化剂表面上发生的化学反应。

固-固界面:焊接接头——焊缝使两固体被粘物牢固结合并成为一个整体;摩擦——两个固体相互接触并相对移动的现象;磨损——两块固体互相接触并相对滑动时,表面层掉落下来成为磨屑,表面因此而发生的损失;合金——一种金属的晶体分布在另一种金属里面;固相反应——两种混合的固体,在一定条件下发生的化学反应。

与界面有关的现象还很多,几乎在自然界、日常生活和生产中到处都存在界面现象,这说明界面现象的广泛性。随着集成电路、微波器件、敏感元件、微晶和超细粉末等的进展,界面问题的研究已取得引人注目的成就,促进了传统工艺的革新,推动了新材料、新工艺的发展。目前界面科学研究的内容主要集中在以下几个方面:

- ① 液-固/气-固界面研究;
- ② 界面与纳米晶块体研究;

- ③ 异相界面研究;
- ④ 界面科学基础研究;
- ⑤ 界面分析技术。

这些方面不仅涉及到晶体的生长、合成、凝固、结晶等复杂的物理化学过程,也涉及到晶界结构和界面的晶体学理论以及金属、合金、结构陶瓷、复合材料等的断裂以及断裂时界面元素的物理化学行为。纳米材料由于其独特的小尺寸效应、量子效应、表面效应和界面效应,从而具有传统材料所不具备的物理、化学特性,其中纳米晶界面原子的电子态以及引起的量子效应是近年来研究的热点。在异相界面研究中,复合材料的异相界面也引起了人们极大关注,改善增强体与基体的异相界面的工作成了复合材料中的热门课题。界面基础科学的研究,包括固体界面的吸附、解吸、偏析,界面热力学和动力学,表面反应和催化过程,界面的原子排列、原子结构和晶格的匹配。界面分析技术是利用各种入射粒子或电磁场与界面上的原子、电子的相互作用,收集界面反射的粒子数量和能量分布,从而分析界面原子、电子结构和化学组成等。

二、界面的分析与检测

界面(包括表面)不是一个简单的几何面,而是具有几个原子厚度的区域,界面不仅存在于材料的外部,而且广泛存在于材料内部,材料的性能与界面性质密切相关。由于界面的原子结构、化学成分和原子键合不同于界面两侧的晶体结构,因而界面的性质与界面两侧有很大的差别,而且在界面上更容易发生化学反应。所以,界面对材料的性能起着极其重要的作用,有时甚至能起控制作用。因此,只有深入了解界面的几何特征、化学键合、界面结构、界面的化学缺陷与结构缺陷、界面稳定性与界面反应及其影响因素,才能在更深的层次上理解界面与材料性能之间的关系,进一步达到利用“界面工程”发展新材料的目的。与此同时,界面研究的成果不仅会给新材料的研制带来促进作用,而且这项工作的深入开展还关系到研究物质表面结构与性能的现代新技术和新仪器的进展。

界面结构的研究是当前材料科学的前沿课题,人们对界面的相组成和相结构、界面区的成分及其分布、近界面基体一侧的位错密度及其分布以及它们与材料总体性能之间的关系进行了广泛的研究。然而,过去由于实验手段的限制,以往的研究工作大部分停留在微米尺度,而大量的精细结构被掩盖。近年来,随着高分辨电子显微术(高分辨电子显微镜、场发射扫描电子显微镜、弹道电子发射显微镜等)及分析电子显微术(扫描隧道电子显微

镜、低能电子衍射、反射高能电子衍射、X光光电子能谱、俄歇电子能谱、二次离子质谱、场离子显微镜、原子探针等)的发展,为在原子尺度直接观察界面结构、界面化学及界面缺陷等的组态和交互作用提供了直观而方便的手段,再配合其他微区形貌、结构和成分分析的方法,并加以综合应用,相互补充,使得人们对界面结构有了更深入的了解。另一方面,随着信息技术的飞速发展,计算材料学也以前所未有的深度和广度,冲击着材料研究的模式^[6,7]。

利用高分辨像可以得到界面的直观图像,与成分分析的信息配合,可进一步阐明界面的原子结构、化学键合、缺陷结构,阐明界面几何结构与界面能量的关系;阐明界面的原子结构、物理化学特性与材料性能之间的关系等,并为新材料的研究发展、材料性能的改善及使用寿命的提高提供理论依据。这方面已经取得了一些有意义的成果,我们将在书中加以介绍。

实验研究固然可以获得一些可控的、重复性的数据,但也非常需要和理论计算结果进行比较、分析,以进一步理解其微观机理。材料的微结构,组成材料的大量原子在空间中的排列,本质上是由原子间的相互作用,即化学键决定的。因此,界面研究,至少涉及界面两侧原子的对势、电子态和电子结构,界面原子键合的本质、结合能、界面两侧晶体结构与界面晶体结构的关系、界面切变模量、界面位错形核与反应、环境对界面过程的影响等多方面的问题。计算材料科学从三个不同的尺寸范畴考虑界面性质:①基于第一原理,从原子尺度考虑几十、几百个分子的多体交互作用;②利用分子动力学和蒙特卡洛方法,从纳米尺度考虑几千至几百万个分子的多体交互作用;③利用有限元方法,从宏观尺度考虑块体材料的工程学问题。许多处理晶体电子态的理论方法和量子化学中的一些方法已被用来处理表面、界面问题。常用求解表面、界面电子能态的方法有赝势法(PP)、紧束缚法(TB)、定域密度泛函法(LDF)、准粒子能带结构法和推广的Huckel方法(EHT),各种计算方法也在不断发展之中。近年来,也有人用分子动力学模型,通过大量计算优选出界面原子最佳位置,然后求出其电荷分布状况及总能量。中国科学院余瑞璜院士提出的“固体与分子经验电子理论”(EET)和计算电子结构的“键距差(BLD)法”^[8,9],以及程开甲的“改进的TFD理论”,都对界面的理论研究起到了推进作用。中国科学院陈难先院士创立的“晶格反演理论”^[10],为异种原子间相互作用势的计算奠定了基础。此外,界面直接观测的实验分析技术和方法,也有待进一步完善。可以预期,在不太长的时间里,界面结构的实验和理论分析、检测技术将会取得更大的进展。

三、界面的结构与性能

众所周知,材料的宏观性质是由其微观结构所决定的,因此,只有深入了解界面的几何特征、化学键合、界面结构、界面的化学缺陷与结构缺陷、界面反应与界面稳定性及其影响因素,才能在更深的层次上理解界面与材料之间的关系,从而进一步达到改善这些材料性能的目的。可以说,现代新材料的发展和应用是人们对材料表面、界面认识逐步深入的结果。

1. 晶界的结构

前已述及,物质与物质间的交界面分为五种类型,固体/气体为固体表面。固体表面是固体最外层浸润在环境气氛中且通常为几个原子层($0.5 \sim 2\text{nm}$)厚度的区域。就研究对象而言,表面科学所涉及的是材料表面和近表层原子的物理化学行为。与体材料相比,系统对称性明显下降,且存在表面微观结构的不完整性以及污染带来的问题。因此,表面原子无论在原子运动、原子结构、电子结构、表面缺陷以及其他物理化学过程中都将体现出与体内原子不同的变化规律和特点。尽管如此,作为凝聚态物理的一个重要分支和多种学科紧密联系的交叉学科,表面科学在很大程度上仍受固体物理的影响,并与材料科学、化学、半导体科学、微电子学等多种学科互相渗透,密切联系。在材料科学中表面科学涉及晶体的外延生长、功能薄膜材料制备、表面改性、腐蚀与防护、环境脆化及其防范等领域。

表面原子与体内原子周围环境不同,受力情况也不同,因而体内固有的晶体学对称性进入表层后受到破坏。与此相关,表面电荷分布、近邻原子数、电子能态和势分布以及振动频率等,也均有别于体内。一般来说,表层原子处于不稳定状态,为使系统能量降低,达到新的平衡,将发生两个过程:一是原子沿垂直于表面移动,称为弛豫;二是平行于表面方向移动,结果形成不同于理想表面二维晶格的超晶格,称为结构重构,如图3所示。

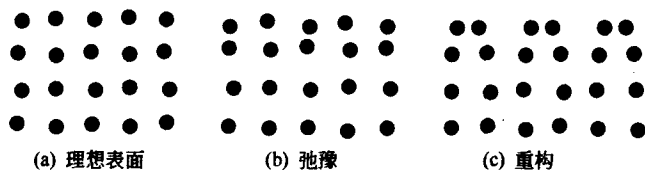


图3 各种表面结构示意图

固体与固体相接触的界面分为两类。两固体为同一结晶相,仅仅结晶学方向不同称晶界,若相邻晶粒不仅取向不同而且晶体结构或成分也不同,即

它们是不同的相，则它们之间的界面称为相间界面，简称相界。根据界面上的原子排列结构不同，可把固体中的相界分为共格的、半共格的以及非共格的三类^[11]。

(1) 共格界面。当两相在某种晶面上具有相同的原子分布方式及相近的原子间距时，两相的晶格在界面上能够相互衔接，一一对应，以致晶界两侧的点阵越过界面是连续的，这种界面称为共格界面，如图 4 所示。不过不同的相的原子间距、原子尺寸总会有些差异，所以共格相界面不会像共格孪晶面那样完整，或多或少地存在着一定的晶格畸变，只是这种畸变不大，还不足以破坏其共格的形式。

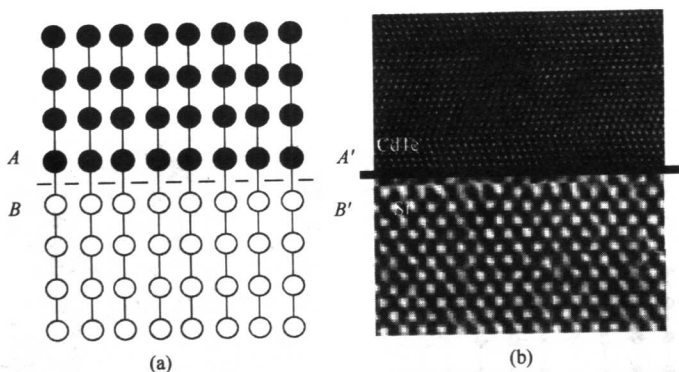


图 4 共格界面

- (a) 每个晶体的化学成分不同，但晶体结构相同；
(b) CdTe(111)/Si(100) 共格界面高分辨像

如果界面上的原子间距不一样，则两个点阵中的一个和两个发生一定畸变后仍有可能保持共格，由此所引起的点阵歪扭称为共格畸变。

(2) 半共格界面。当相邻两相的结构相差较大时，相界面不能再维持完全共格，而出现了一系列非共格的部分，这种情况通常是在界面上形成一系列的刃型位错线，以此来补偿界面上原子间的不匹配，并使界面上的畸变和弹性应变能降至最低。从能量角度而言，以半共格界面代替共格界面更为有利，如图 5 所示。

(3) 非共格界面。当两个邻接的相在界面上的原子排列结构差异很大时，界面两侧就不可能有很好的匹配。若两相原子排列差异很大或是即使它们的排列相似但原子间距差异超过 25%，这两种情况都产生所说的非共格界面。一般说来，两个任意取向的晶体沿任意面接合就获得非共格界面，如图 6 所示。

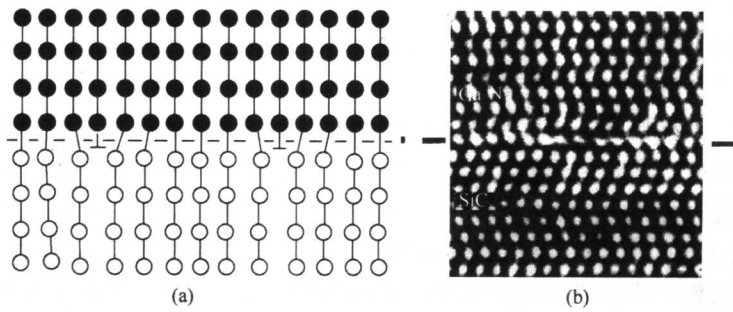


图 5 半共格界面

- (a) 平行于界面的错配有一系列刃型位错；
(b) GaN/SiC 半共格界面高分辨像

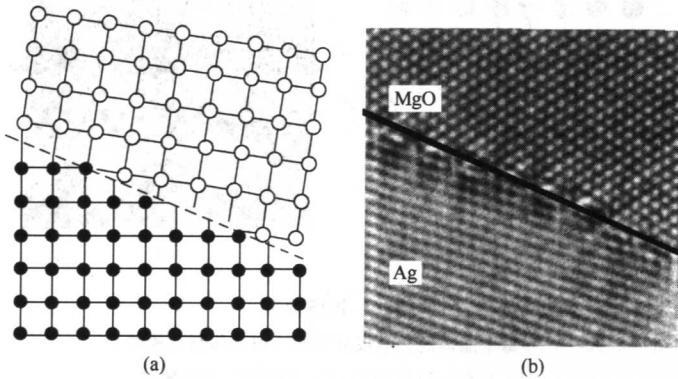


图 6 非共格界面

- (a) 平行于界面的匹配很差；(b) MgO/Ag 非共格界面高分辨像

2. 晶界的结合状况

材料存在多种界面结合形式，对于具体给定的材料往往同时存在不止一种的界面结合机制，而且在材料制备各阶段或使用过程中，界面结合机制可能会发生变化。

(1) 机械结合。材料在结合面之间的机械啮合，如台阶状界面或锯齿状界面可导致界面结合。机械啮合作用越强，界面结合力越大，特别是界面剪切强度增加幅度更大。多数情况下，界面结合不是单一的机械结合，而是和其他类型结合形式共存的。

(2) 静电作用结合。材料在结合面带有异性电荷，产生静电吸引作用，使界面结合强度增加，结合力大小取决于二者的表面电荷量，静电作用结合

只在短程范围内存在,即仅在原子尺度距离内产生作用。界面存在杂质和残余气体会减弱静电作用结合。

(3) 化学结合。材料在结合面之间发生电子转移,形成界面原子间的化学键结合。界面化学结合强度取决于键的类型和单位面积键的数量。

(4) 界面扩散结合。在一定条件下,材料在结合面处发生扩散现象,形成扩散结合。通常,扩散层具有不同于界面两侧晶体成分的性质。界面扩散与通常的体内扩散明显不同,有其自身特点和微观机制,但这方面的研究较少,有待深入研究。

(5) 界面化学反应。材料在结合面发生化学反应,生成新相。界面反应是一个复杂的过程,不仅取决于界面两侧参与反应的物质类型、结构和特性,还取决于反应条件,如温度、压强、浓度等。这种反应也常常与吸附、偏析和扩散等化学过程交织在一起。

3. 晶界的性能

界面微观结构的研究使人们掌握了晶界结构与断裂行为,界面处微量杂质元素与晶界偏析、晶界裂纹产生的关系。这极大地促进了人们对界面结构、成分与性能间关系的理解和认识。

严格地讲,界面的结构与性能之间的关系属于多学科的交叉,既属材料,又属物理、化学领域的研究范畴,界面原子结构与诸性质的研究,促进了相关学科的发展。不论界面原子结构还是化学组成都是材料界面不可缺少的信息,并不直接与材料性质发生关系,只有界面电子结合状态才直接与材料界面诸性质相关。可以说,界面研究的本质和主要内容是研究界面电子能带结构。界面电子态通过电子波函数、能态密度和能谱的构成反映出来,这些参数决定了界面的电子发射、吸收特性、化学活性和催化特性。因此,通过界面电子结构的计算可以展示界面电子结构与强界面结合和弱界面结合、基体与强化相、母相与析出相增强增韧、特殊碳化物与再结晶晶粒长大、复相界面与加工工艺等性能和现象的关系。

另一方面,界面性能的研究中,界面细观力学的研究最为热门。为了更好地研究复合材料的界面效应,揭示复合材料细观特征对其性能的影响,20世纪50年代初就开始了界面细观力学的研究^[12],即如何用细观力学的理论和方法去预报和分析其性能、揭示界面强度、界面损伤和破坏的本质。沿双材料结合面的裂纹是研究最早也是最多的界面断裂力学问题,虽然目前还尚未形成一个成熟的完整的界面断裂力学理论,但是围绕着沿界面裂纹的应力振荡、接触区、裂纹分叉、线弹性界面断裂和弹塑性界面断裂等问题已有大量的文献发表,并取得了卓有成效的研究成果。无论是用理论还是实验方法