

特约专栏

材料界面原子、电子结构的设计与表征

张振华¹, 刘伟伟¹, 许并社², 郭俊杰¹

(1. 杭州电子科技大学材料与环境工程学院, 浙江 杭州 310018)

(2. 太原理工大学 新材料界面科学与工程教育部重点实验室, 山西 太原 030024)

摘要: 材料的变形与相变、晶体生长、电荷分离传输、催化反应等过程均涉及到材料中的界面问题, 并且紧密依赖于界面附近的原子和电子结构。因此, 可以通过调控材料的界面原子、电子结构来赋予材料特殊的新功能。介绍了材料界面研究的最新进展, 枚举了研究者如何获得固-固材料界面的原子结构, 在光催化和太阳能电池中如何利用界面分离和电荷传输及电子全息技术定量分析二维电子气, 以及在材料生长和催化过程中的固-液和固-气界面演化。这些研究结果展示了人们对界面原子、电子结构前所未有的认知, 这些科学而直观的构效关系对于启发研究者设计和构筑更加精细、高效的界面结构提出了新思路。

关键词: 界面; 原子结构; 电子结构; 透射电子显微镜

中图分类号: TN383 **文献标识码:** A **文章编号:** 1674-3962(2019)08-0742-06

Design and Characterization of Atom and Electron Structure at Materials Interface

ZHANG Zhenhua¹, LIU Weiwei¹, XU Bingshe², GUO Junjie¹

(1. College of Materials and Environmental Engineering, Hangzhou Dianzi University, Hangzhou 310018, China)

(2. Key Laboratory of Interface Science and Engineering in Advanced Materials of Ministry of Education, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

Abstract: The progresses such as mechanical deformation and phase transition, crystal growth, charge separation and transportation, catalysis are basically interface problems in materials. These interface phenomena depend on the atomic configuration and electronic structure at interfaces. Accordingly, we can endow the materials specialized functions by design the interface structures at atomic and electronic scale. In this brief review, three interfaces, solid-solid, solid-liquid and solid-gas are discussed. New research progresses on interface of materials, including the atomic structure characterization, the interface application on charge separation in photocatalysis and solar cell, visualization and quantification of 2D electron gas using inline electron holography, the evolution of interface during materials growth and catalysis are introduced. These new findings show an unprecedented knowledge on the atomic structure and electronic structure of material interface. The structure and property relationship was revealed directly and would inspire creative works to design more complex and efficient material interfaces.

Key words: interface; atomic structure; electronic structure; transmission electron microscope

1 前言

材料的界面涉及材料性能的各个方面, 力学变形^[1,2], 电荷分离、输运^[3-7], 催化^[8,9], 材料生长^[10]等

都与界面的原子、电子结构紧密相关^[11-13]。同时, 形成不同材料的异质多层结构以设计产生新奇的界面现象, 也是近几年来相关领域的研究热点^[14-16]。界面的空间分布一般局限在几个纳米, 在这样的尺度下分析界面的原子结构和电子结构, 观察材料服役条件下界面结构的演变, 能够帮助人们深入理解材料界面的构效关系, 以设计新型界面, 对材料学研究有着重要的意义。本文将通过总结分析近几年材料界面研究的最近进展, 向读者展示研究者对不同界面的认识水平、界面研究的方向和先进的研究方法。

收稿日期: 2018-09-11 修回日期: 2018-11-03

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11904068, 51501124)

第一作者: 张振华, 男, 1986 年生, 讲师

通讯作者: 郭俊杰, 男, 1980 年生, 教授, 博士生导师,

Email: jguo@hdu.edu.cn

DOI: 10.7502/j.issn.1674-3962.201809011

2 界面类型

广义的界面包括固相、液相和气相两两间的分界面。狭义的界面主要指固相与固相之间的界面，如晶界、相界、畴界、异质结等。如图1所示，本文将关注固-固、固-液和固-气3种界面，重点讨论固-固界面的研究进展(2.1节)，包括界面的原子结构和电子结构；简要介绍固-液和固-气界面的结构演变(2.2节)，即当固相材料处于液相或气相当中时，其表面结构的演变。

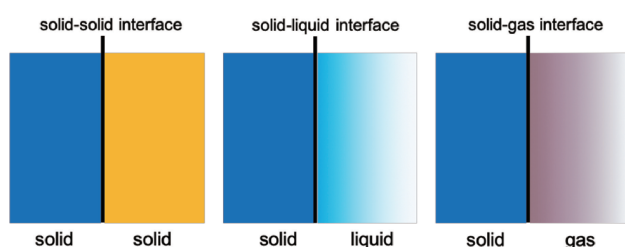


图1 本文将介绍的三种界面：固-固，固-液和固-气界面

Fig.1 Three interfaces we introduced here: solid-solid interface, solid-liquid interface and solid-gas interface

2.1 固-固界面

固-固界面是材料科学当中研究最多的界面。在结构材料中，界面常被用来协调变形；在功能材料中，通过界面的能带结构设计可以产生新奇的界面现象，用于有效分离载流子以及产生二维电子气等，所以在对固-固界面的研究中，界面的原子结构和电子结构是研究的热点，

也最能反映界面的功能特征。

2.1.1 固-固界面的原子结构

透射电子显微镜是以电子束为光源的显微镜，电子经过加速后与所要观察的材料样品相互作用，电子的相位和振幅被样品改变，透过样品后出射电子已携带了样品信息，这些信息在透射电子显微镜的像平面被重建。由于加速电子的波长很小($\lambda = 0.00273 \text{ nm}$ ，加速电压200 kV)，再加上球差校正技术的引入^[17-19]，透射电子显微镜的空间分辨率可以达到皮米(10^{-12} m)，能够很好地解析固-固界面的原子结构。

图2显示了通过球差校正电镜获得的界面原子结构。图2a和2b为高角环形暗场像(high angle annular dark field, HAADF)照片^[1, 20]。在HAADF照片中，图像强度与元素的原子序数成正比(Z^δ , $\delta = 1.5 \sim 2$)，所以在图2b中，原子序数较大的钆原子较镁原子亮，表现为图像中的亮点。同时，结合电子能量损失谱(electron energy loss spectra, EELS)等谱学手段，可以直接确定晶界上的掺杂元素类型和掺杂元素位置，如图2a所示，钙、钛掺杂元素有规律地分布在晶界中。除了获得定性的分析外，结合透射电子显微镜的成像原理，通过理论分析计算模拟还可以获得定量的测量结果，如图2c所示，研究者获得了钛酸钡孪晶界上氧原子的占位率，量化地给出了发生在界面上的氧缺陷^[21]。

所以，通过先进的电子显微学手段可以定性和定量地获得我们关注的界面原子结构，评价界面质量、缺陷态等与界面性能相关的信息。

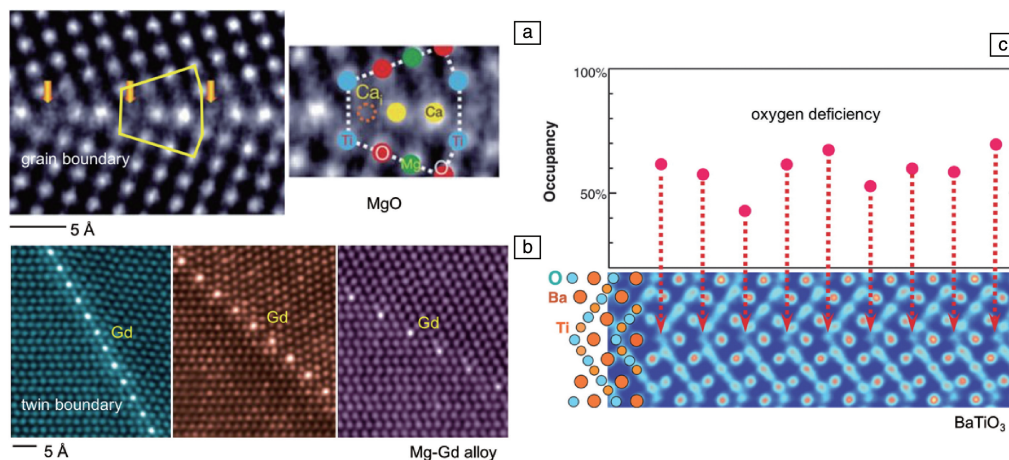


图2 界面的原子结构：(a) HAADF 照片显示 MgO 晶界上规则分布的掺杂原子钙和钛^[20]；(b) 结构材料镁合金的 HAADF 照片，显示在镁合金中沿孪晶界周期分布的钆原子，即图中孪晶界上的亮点^[1]；(c) 量化钛酸钡孪晶界上的氧原子占位率，显示了在孪晶界上氧原子的缺失^[21]

Fig. 2 The atomic structure of interface: (a) HAADF images showing the segregation of Ca and Ti atoms at grain boundary in MgO ^[20]; (b) periodic segregation of solute Gd atoms at twin boundary of Mg-Gd alloy^[1]; (c) quantification of the oxygen occupancy at twin boundary in BaTiO_3 , revealing the oxygen deficiency locally at twin boundary^[21]

2.1.2 固-固界面的电子结构

在实际应用中,人们设计固-固界面主要是为了获得理想、新奇的电子结构。界面处对称性改变,电荷、自旋以及轨道发生重建,从而使电荷分离、二维电子气、界面超导等现象能够实现。

在太阳能的利用中,光催化和光伏是两个非常重要的过程,与之对应的分别为光催化剂和太阳能电池。吸收太阳光后,光子在材料内部激发高能电子-空穴对,被称为光生载流子。电子-空穴对被用来参与氧化、还原化学反应的即光催化过程;光生载流子被用于在闭合回路中产生光生电流的即太阳能电池。光激发产生的电子-空穴对如果不能进行及时分离的话,就会很快发生复合,电子-空穴复合会辐射可见光,这就是有机、无机发光二极管。在光催化反应和太阳能电池中,则要减少这样电子和空穴载流子的复合,才能提高光催化和太阳能电池的效率。事实上,为了降低电子-空穴的复合率,研究者们做出了很多努力,构筑界面来进行电荷的分离和传输便是其中行之有效的方式之一。

图 3a 给出了负载型光催化剂光催化产氢的机理^[22-25]。金属纳米颗粒,如钯、金被负载在二氧化钛等半导体基体上形成半导体-金属界面。由于半导体含有带隙,金属没有带隙,半导体有较高的功函数,所以会在半导体-金属的界面处发生能带弯曲,形成肖托基势垒。而这个肖托基结只允许电子通过,故而能够有效地分离电子和空穴,抑制电子和空穴的复合,提高产氢效率。在光催化产氢过程中,半导体吸收光子产生电子-空穴对,电子被分离转移至金属颗粒活性位点,并与吸附在金属表面的质子结合产生氢气。

近年来,钙钛矿太阳能电池的研究取得了很大的进展。太阳能电池的效率和稳定性得到了很大的提高,逐渐达到产业化水平^[3, 5, 26]。太阳能电池利用太阳光产生电子-空穴载流子,这些载流子定向移动形成光电流。为了高效地产生、分离和传输光生载流子,钙钛矿太阳能电池常为若干不同功能层构成的多层结构^[27],图 3b 为多层有机钙钛矿太阳能电池各层的能带结构^[5]。电池由钙钛矿层、电子传输层、空穴传输层和电极层组成。电子-空穴在钙钛矿层产生后,电子被分离经由电子传输层钪掺杂的二氧化钛(Y:TiO_2)到达聚乙氧基乙烯基胺(PEIE)修饰的透明电极 ITO,空穴进入空穴传输层到达金电极。这样的界面能带结构非常便于电子和空穴的分离和定向移动,使电池的能量转化率最大值达到 19.3% (2014 年)^[5]。通过界面工程不断改进界面性质,溶液法太阳能电池效率的世界纪录不断被刷新。

二维电子气是另外一个重要的界面现象,它是由于

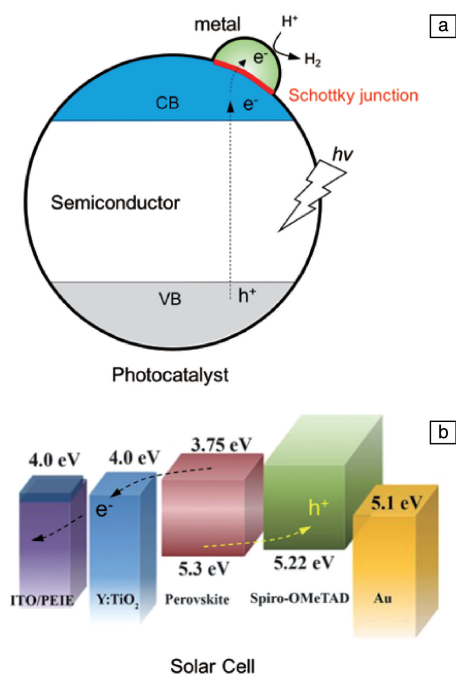


图 3 界面用于电荷分离的机理示意图:(a)半导体和金属接触在界面上形成肖托基势垒用于分离光生电子和空穴;(b)有机钙钛矿太阳能电池多层结构各层的能带结构,通过界面工程改善电荷的分离和传输^[5]

Fig. 3 Schematics of the interface for charge separation: (a) the Schottky junction formed at the semiconductor-metal interface to separate the photogenerated electron-hole (e^-h^+); (b) the diagram of energy level of perovskite solar cell multi-junction and the interface was engineered to improve the charge separation and transportation^[5]

界面对称性破缺导致轨道重建而产生的^[14]。电子的移动被限域在界面二维平面内,电子密度高的二维电子气也被称为二维电子液体。如果被限域的是二维的空穴则为二维空穴气。典型的例子为钙钛矿氧化物界面间形成的二维电子气。由于电子气分布在界面附近几个纳米的空间区域内,所以要定量地表征二维电子气就需要测量手段对高浓度电子具有较高的敏感度,同时要求测量手段具有非常高的空间分辨率。

电子全息技术则能够满足这些要求。电子全息技术依托透射电子显微镜获取,对材料中电荷和静电势的变化非常敏感。在图 4a 中,研究者利用电子全息技术绘制了二维电子液体在铝酸镧(LaAlO_3 , LAO)和钛酸锶(SrTiO_3 , STO)在(001)界面上的分布^[7]。通过该技术可以定量测量界面上的电子浓度($\sim 10^{21} \text{ cm}^{-3}$),同时,二维电子液体分布在界面附近小于 2 nm 的区域范围内。

图 4b 概括了利用电子全息技术定量测量铝酸镧、钛酸锶界面二维电子液体分布的原理^[7]。在透射电子显微镜中,入射电子平行于界面(001)入射。入射电子具有相

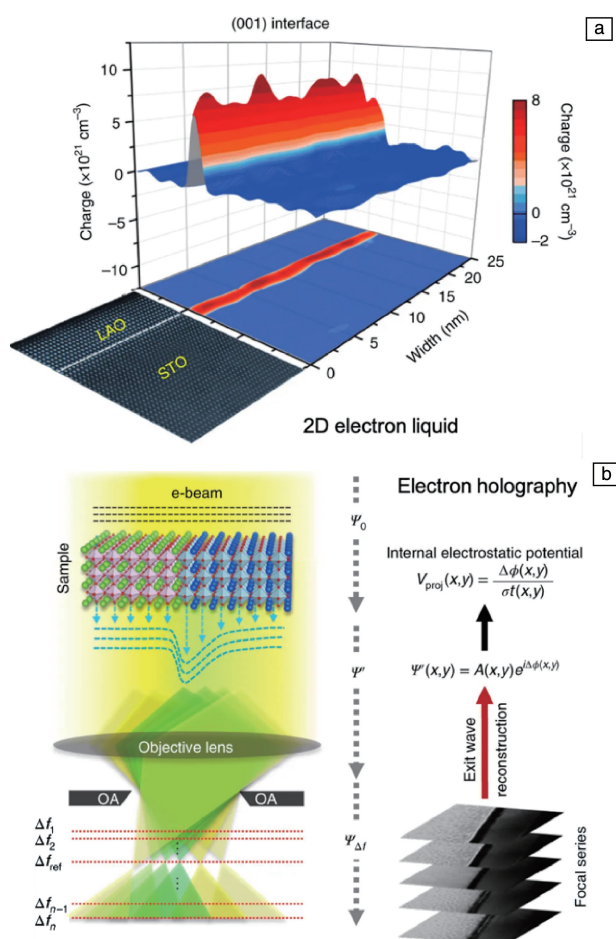


图4 利用电子全息技术定量表征二维电子液体^[7]: (a) 铝酸镧和钛酸锶(001)界面上的电荷面分布图; (b) 电子全息技术的基本原理, 出射波函数 Ψ' 通过一系列的欠焦像重构, 通过出射电子相对于入射电子的相位改变 $\Delta\phi$ 求得材料内部的投影电势 V_{proj} 和界面处的电荷分布

Fig. 4 2D electron liquid (2DEL) and inline electron holography^[7]: (a) the charge density mapping at the (001) interface between LAO and STO; (b) the conceptual representation of the electrostatic potential mapping by inline electron holography for 2DEL imaging. The exit wave function Ψ' is reconstructed by series of images that are recorded at different focus. The projected electrostatic potential and charge density are derived by the phase shift of $\Delta\phi$ in Ψ'

同的波函数 Ψ_0 , 入射电子进入样品与样品中的电子和原子核发生相互作用, 波函数的相位发生变化, 出射电子的波函数为 Ψ' 。 $\Psi'(x, y) = A(x, y)e^{i\Delta\phi(x, y)}$, 其中 A 为出射波函数的振幅, $\Delta\phi$ 为相位的改变。 $\Delta\phi$ 正比于样品内部的投影电势 V_{proj} , 有 $V_{\text{proj}}(x, y) = \frac{\Delta\phi(x, y)}{\sigma \cdot t(x, y)}$, 其中 σ 为相互作用常数, t 为样品局部的厚度。根据 V_{proj} 可以计算样品内部的电荷浓度。在界面处, 由于电荷浓度的差异

导致 V_{proj} 发生变化。所以只要获得 $\Delta\phi$ 就能够得到样品内部的投影电势、电荷浓度分布等信息。为此需要获得一系列欠焦量(Δf)下的图像 $\Psi_{\Delta f}$, 以重构出射波函数 Ψ' , 获得 $\Delta\phi$, 最终获得图4a界面上电荷浓度的面分布。

2.2 固-液界面和固-气界面

材料的固-液或固-气界面即当材料处于液相或气相当中时固相材料的表面。很多常见的现象或过程都与材料的固-液和固-气界面有关, 如材料的生长、催化反应、腐蚀、溶解等^[28-32]。这些过程既是热力学过程亦是动力学过程, 所以研究这些界面的演变能够使我们更好地认识这些现象的本质, 有的放矢, 便于我们更好地调控这些过程的发生。

近几年快速发展的原位电子显微学为揭示这些动态过程提供了有效的研究手段。液体和气氛环境被引入到透射电子显微镜中, 使在原子尺度下可以观察固-液、固-气界面演变, 研究材料的生长机理, 材料在实际使用环境下的结构响应等关键科学问题逐渐成为可能。在透射电子显微镜中, 液体环境通过在透射电子显微镜样品杆前端引入液体腔来实现。液体可以被预封装在液体腔中进入透射电子显微镜, 也可以在液体腔进入电镜后通过蠕动泵泵入液体腔中^[33]。液体腔一般是由数片硅材质的芯片组装而成的腔体, 腔体留有氮化硅窗口, 保持对电子束透明; 也可以是两层石墨烯包裹起来的密闭液体。液体腔中液层的厚度在几百个纳米左右。气体的引入同液体腔类似, 气体由外部泵入样品杆中密闭的腔室中^[30]。我们所要观察研究的材料位于液体或气体腔中。

图5a为贵金属铂颗粒在铂前驱体溶液中长大过程中颗粒形貌、表面结构的演变过程^[10]。在铂颗粒很小的时候(22和55 s), 颗粒每个面, $\{111\}$ 、 $\{110\}$ 和 $\{100\}$, 生长速度基本相同, 颗粒的形貌接近于圆形。随着颗粒增大, 颗粒表现为截角八面体的形貌(70和85 s)。在107和143 s, $\{100\}$ 面已停止生长, 但 $\{111\}$ 和 $\{110\}$ 继续保持生长。由于面心立方铂颗粒沿 $\langle 111 \rangle$ 方向生长速度大于 $\langle 100 \rangle$ 和 $\langle 110 \rangle$, 所以在颗粒长大的过程中, 颗粒的 $\{111\}$ 暴露面逐渐消失, $\{100\}$ 和 $\{110\}$ 暴露面被保留下来成为颗粒的表面, 颗粒成为立方体形貌。可见, 决定颗粒最终形貌的是各个表面的生长速度而非各个面的表面能, 即动力学过程而非热力学过程。

催化, 特别是异质催化与催化剂的表面结构紧密相关。图5b展示了纳米铂颗粒催化剂在催化一氧化碳氧化过程中颗粒形貌的振荡过程^[28]。将铂颗粒放置于气体腔中进行催化反应。气体腔中 CO 、 O_2 、 He 混合气体的压强为1个大气压, 温度为659 K。在催化过程中, 反应气 CO 、 O_2 分子首先吸附在铂表面, 随后 CO 和 O 结合生成中间产物, 最后中间产物解吸附生成终产物 CO_2 , 完成

一个催化循环, 催化剂恢复到初始状态。图 5b 中铂颗粒形貌的振荡恰恰反映了铂颗粒参与的周期催化过程, 催化循环结束, 铂颗粒的表面恢复到初始状态, 完成再生。

通过原位透射电子显微学手段, 人们对催化、生长等固-液和固-气界面问题有了崭新的认识。

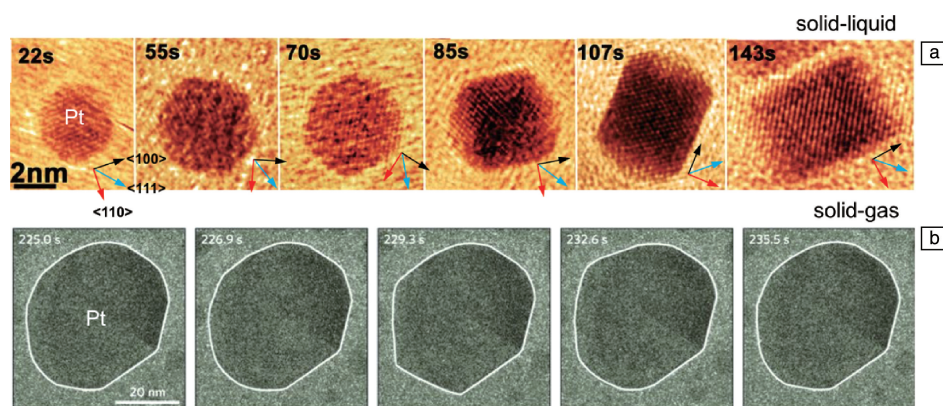


图 5 固-液界面和固-气界面的演变过程: (a) 铂颗粒在铂前驱体溶液中不同时刻下的 TEM 照片^[10]; (b) 贵金属铂颗粒在催化氧化一氧化碳过程中的形貌演变的 TEM 照片, 反应气为 $V(\text{CO}) : V(\text{O}_2) : V(\text{He}) = 3\% : 42\% : 55\%$, 反应气压强为一个大气压, 温度为 659 K^[28]

Fig. 5 The evolution of solid-liquid interface and solid-gas interface: (a) TEM images showing the growth of Pt particle in Pt precursor solution^[10]; (b) TEM images showing the morphology oscillatory of Pt particle when catalyzing CO oxidation at 0.1 MPa of feeding gas ($V(\text{CO}) : V(\text{O}_2) : V(\text{He}) = 3\% : 42\% : 55\%$) at 659 K^[28]

3 结 语

人们发展了界面工程来设计构建可以实现特定功能的界面, 这些功能是单一材料构成所不能实现的。界面的原子结构和电子结构决定了界面的功能, 所以在原子尺度下认识界面的原子、电子结构能够使人们进一步理解界面的构效关系, 更好地指导人们的设计。在认识过程中, 先进透射电子显微学发挥了它的优势, 界面处原子的分布、二维电子气电荷浓度分布、液体和气体存在下固体表面结构的演变等科学问题得到了很好的研究。在此基础上, 人们可以设计更加复杂、精细的界面结构, 特别是在二维材料体系被发现的今天。

参考文献 References

- [1] NIE J F, ZHU Y M, LIU J Z, *et al.* Science[J], 2013, 340(6135): 957-960.
- [2] PAN Q, ZHOU H, LU Q, *et al.* Nature[J], 2017, 551(7679): 214.
- [3] GRAETZEL M, JANSSEN R A J, MITZI D B, *et al.* Nature[J], 2012, 488(7411): 304-312.
- [4] SCANLON D O, DUNNILL C W, BUCKERIDGE J, *et al.* Nature Materials[J], 2013(9), 12: 798-801.
- [5] ZHOU H, CHEN Q, LI G, *et al.* Science[J], 2014, 345(6196): 542-546.
- [6] LEE H, CAMPBELL N, LEE J, *et al.* Nature Materials[J], 2018, 17(3): 231-236.
- [7] SONG K, RYU S, LEE H, *et al.* Nature Nanotechnology[J], 2018, 13(3): 198-203.
- [8] CHEN S S, TAKATA T, DOMEN K. Nature Reviews Materials[J], 2017, 2(10): 17050.
- [9] LI R G, ZHANG F X, WANG D G, *et al.* Nature Communications[J], 2013, 4: 1432.
- [10] LIAO H G, ZHEREBETSKYY D, XIN H, *et al.* Science[J], 2014, 345(6199): 916-919.
- [11] ZHANG X, GUO J J, GUAN P F, *et al.* Physical Review Letters[J], 2015, 115(14): 147601.
- [12] ZHAO X B, JIN C M, WANG C, *et al.* Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America[J], 2016, 113(18): 4918-4923.
- [13] TIKEKAR M D, CHOUDHURY S, TU Z Y, *et al.* Nature Energy[J], 2016, 1(9): 16114.
- [14] HWANG H Y, IWASA Y, KAWASAKI M, *et al.* Nature Materials[J], 2012, 11(2): 103-113.
- [15] NOVOSELOV K S, MISHCHENKO A, CARVALHO A, *et al.* Science[J], 2016, 353(6298): aac9439.
- [16] ZHANG Z H, GUO H, DING W Q, *et al.* Nano Letters[J], 2017, 17(2): 851-855.
- [17] URBAN K W. Science[J], 2008, 321(5888): 506-510.
- [18] GAO P, ZHANG Z Y, LI M Q, *et al.* Nature Communications[J], 2017, 8: 15549.
- [19] GUO J, LEE J, CONTESCU C I, *et al.* Nature Communications[J], 2014, 5: 5389.
- [20] WANG Z C S, AITO M, MCKENNA K P, *et al.* Nature[J], 2011, 479(7373): 380.
- [21] JIA C L, URBAN K. Science[J], 2004, 303(5666): 2001-2004.

- [22] JOO J B, DILLON R, LEE I, *et al.* Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America[J], 2014, 111(22): 7942–7947.
- [23] MAEDA K. ACS Catalysis[J], 2013, 3(7): 1486–1503.
- [24] KUDO A, MISEKI Y. Chemical Society Reviews[J], 2009, 38(1): 253–278.
- [25] ZHUANG Z C, LI Y, LI Z L, *et al.* Angewandte Chemie International Edition[J], 2018, 57(2): 496–500.
- [26] LIU M, JOHNSTON M B, SNAITH H J. Nature[J], 2013, 501(7467): 395.
- [27] STRANKS S D, EPERON G E, GRANCINI G, *et al.* Science[J], 2013, 342(6156): 341–344.
- [28] VENDELBO S B, ELKJÆR C F, FALSIG H, *et al.* Nature Materials[J], 2014, 13(9): 884–890.
- [29] YUK J M, PARK J, ERCIUS P, *et al.* Science[J], 2012, 336(6077): 61–64.
- [30] JIANG Y, LI H B, WU Z M, *et al.* Angewandte Chemie International Edition[J], 2016, 55(40): 12427–12430.
- [31] LU Y, YIN W J, PENG K L, *et al.* Nature Communications[J], 2018, 9(1): 2752.
- [32] ZHU C, LIANG S X, SONG E H, *et al.* Nature Communications[J], 2018, 9(1): 421.
- [33] JONGE N D, ROSS F M. Nature Nanotechnology[J], 2011, 6(11): 695–704.

(编辑 吴 锐)



专栏特约编辑许并社



专栏特约编辑郭俊杰



特约撰稿人顾新福



特约撰稿人张振华



特约撰稿人江 勇

许并社：男，1955 年生，教授，博士生导师，国家杰出青年基金获得者，全国杰出专业技术人才，国家重点学科材料加工工程首席学科带头人，国务院享受政府特殊津贴专家，中央和山西省委联系的高级专家。现任半导体照明关键技术及工艺国家地方联合研究中心主任、新型光电薄膜材料及器件山西省协同创新中心主任等职。兼任《复合材料学报》、《中国材料进展》、《电子显微学报》等期刊编委。在 *Nature Communication*, *Nanoscale* 等国内外知名学术期刊发表学术论文 468 篇。授权中、日、美、欧、韩等多国专利 239 项；以第一完成人获国家技术发明和科技进步二等奖各 1 项、省部级自然科学和科技进步奖共

13 项。先后获得“教育部跨世纪优秀人才”、“全国回国留学人员先进个人”等荣誉称号。

郭俊杰：男，太原理工大学教授，博士生导师。长期从事金属/石墨烯炭复合材料的结构设计与原子尺度精确表征。主持国家自然科学基金，山西省基础研究计划，人社部、山西省留学人员科技活动项目择优资助等科研项目，曾经获得山西省“百人计划”特聘专家，青年三晋学者（2016），“三晋英才”支持计划拔尖骨干人才，山西省委组织部“百人计划”创新团队带头人（高校唯一入选团队），山西省高校优秀青年学术带头人，山西省学术技术带头人（2015），山西省高校“131”领军人才工程（第二层次），中共

山西省委联系服务的高级专家，山西省科学技术奖二等奖（第一完成人）等奖励与荣誉。

顾新福：男，1981 年生，2011 年毕业于清华大学，获工学博士学位，2011~2012 年在北京有色金属研究总院下属有研亿金新材料股份有限公司从事溅射靶材研发，2012~2016 年在日本东北大学金属材料研究所从事博士后研究。2016 年至今于北京科技大学任讲师。主要研究领域包括材料相变晶体学、析出强化型镁合金开发、背散射电子衍射（EBSD）后处理开发等，主要涉及镁合金、钛合金、电工钢等多种金属材料。参译著作 1 部，独立开发晶体学分析软件 PTCLab 和 pyEBSD 两款，在 *Acta Materialia*, *Scripta*

Materialia 等期刊发表 SCI 论文 30 余篇。

张振华：男，1986 年生，杭州电子科技大学浙江省磁性材料研究院助理研究员。2017 年毕业于北京工业大学固体微结构与性能研究所超显微中心，获材料科学与工程工学博士学位。在 *Nano Letters* 等学术期刊发表多篇论文，主持国家自然科学基金 1 项。研究方向为：材料的微观结构（表界面、缺陷），金属-绝缘体转变 MIT 的调控，原位电子显微学（热、电、液体），纳米功能材料器件。

江 勇：男，1973 年生，中南大学材料学院教授，博士生导师，院长助理。2010 年回国，任中南大学“升华学者”特聘教授。2011 年入选教育部新世纪人才计划。

长期专注于材料表面和界面结构与性能的基础性研究，以及新合金、高温涂层、金属基复合材料等设计和制备新方法。目前已承担或参与国家自然科学基金项目 5 项、承担国家重大研发计划课题 1 项、国家“973”子项目 1 项、省部级产学研重点项目 1 项。在 *Acta Materialia*, *Scripta Materialia*, *Physical Review B*, *Applied Physics Letters*, *Journal of the American Ceramic Society* 等期刊发表 SCI 论文 80 余篇，SCI 引用 1050 次，单篇最高他引 134 次。*Metallurgical and Materials Transactions* 主审委员（Key Reader）、*Acta Metallurgica Sinica* 编委、中国材料研究会凝固分会理事、国家自然科学基金和以色列科学基金评审人。