

• 研究论文 •

HMX/TATB 复合材料弹性性能的 MD 模拟

朱伟^a 肖继军^a 赵峰^b 姬广富^b 马秀芳^a 肖鹤鸣^{*a}

(^a南京理工大学化工学院分子与材料计算研究所 南京 210094)

(^b中国工程物理研究院流体物理研究所 绵阳 621900)

摘要 用分子动力学(MD)方法 COMPASS 力场, 分别在正则系综(NVT)和等温等压系综(NPT)下, 模拟计算了著名常用高能炸药 HMX(环四甲撑四硝胺)与著名钝感炸药 TATB (1,3,5-三氨基-2,4,6 三硝基苯)所构成的混合体系在室温时的弹性性能和结合能. 结果表明, 在 NVT 和 NPT 两种系综下模拟所得结果呈平行一致的趋势; 与纯 HMX 相比, HMX/TATB 复合材料的拉伸模量、体模量和剪切模量均有所下降; 在 NVT 系综下, 还完成了 HMX/TATB 混合体系的不同温度的 MD 模拟. 发现当温度在 245~345 K 范围时, 体系的刚性和弹性变化很小; 但当温度达到 395 K 时, 材料的刚性减弱, 柔性增强.

关键词 1,3,5-三氨基-2,4,6 三硝基苯(TATB); 环四甲撑四硝胺(HMX); 复合材料; 弹性性能; 分子动力学

Molecular Dynamics Simulation of Elastic Properties of HMX/TATB Composite

ZHU, Wei^a XIAO, Ji-Jun^a ZHAO, Feng^b JI, Guang-Fu^b MA, Xiu-Fang^a

XIAO, He-Ming^{*a}

(^a Institute of Molecule and Material Computational Chemistry, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094)

(^b Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900)

Abstract The elastic properties and binding energy of composite which consists of famous high insensitive explosive TATB (1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene) crystal and the well-known high explosive β -HMX (cyclotetramethylene tetranitramine) crystal have been simulated by molecular dynamics (MD) and COMPASS force field in NVT and NPT ensemble by DISCOVER model block in the Materials Studio software package. Their elastic coefficients, moduli and Poisson's ratios were calculated at room temperature. The outcomes obtained from NVT and NPT ensemble show similar parallel trend. The composite was also simulated in NVT ensemble at different temperatures. The results show that at the temperature of 245 to 345 K the elastic properties of HMX/TATB composites remain unchanged. When the temperature rises to 395 K, the rigidity decreases and the flexibility increases.

Keywords TATB (1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene); HMX (cyclotetramethylene tetranitramine); composite; elastic property; molecular dynamics

实际使用的含能材料(Energetic materials), 无论是军用或民用, 也无论是作为传爆药、猛炸药或作为推进

剂、发射药使用, 都不是成分单一的化合物, 而是多组分的混合物, 亦即都是复合材料. 因而研究复合材料

* E-mail: xiao@mail.njust.edu.cn.

Received October 10, 2005; revised March 9, 2007; accepted March 16, 2004.

中国工程物理研究院流体物理研究所重点实验室基金(No. 51478010105BQ0201)和国家自然科学基金(No. 10176012)资助项目.

的结构-性能关系至关重要^[1~4]. 近年来运用量子力学(QM), 尤其是分子动力学(MD)方法模拟这些复合材料的报道引人注目^[4~12]. 不过所有这些报导都是针对双组分 PBX(高聚物粘结炸药)的, 即均含有高聚物, 与纯炸药相比 PBX 的力学性能均有明显改进^[7~9, 11~12].

本文以著名常用高能炸药 HMX(环四甲撑四硝胺)与著名钝感炸药 TATB (1,3,5-三氨基-2,4,6 三硝基苯)所构成的复合材料为例, 用分子动力学(MD)方法加以模拟计算, 探讨不存在高聚物条件下的复合高能材料的弹性性能; 比较了不同系综(NVT 和 NPT)下的计算结果; 还探讨了不同温度下弹性性能的递变状况, 从而获得了兼有理论和实用价值的新的结果和规律.

1 原理、方法和模型

1.1 MD 模拟

考虑到在较高温度下研制混合炸药时, 存在主体炸药开裂, 其它组分炸药渗入, 以及在长期贮存中炸药组分间相互渗透等情况, 我们选取将 TATB 添加到主体炸药 HMX 超晶胞中的理论模型^[7,8]. 运用 Materials Studio^[13] 程序包 Visualizer 模块, 依据 TATB^[14] 和 β -HMX^[15] X 射线衍射单晶数据, 构建 HMX/TATB 混合体系待模拟的初始构型(参见图 1), 其中 TATB 约占 6.3%. 然后在 COMPASS^[16] 力场下, 分别选取 NPT 和 NVT 系综, 温度设定为 295 K, 进行 MD 周期性模拟研究. 初始原子运动速度按 Maxwell-Boltzman 分布确定. 积分采用 Verlet Velocity 方法, 时间步长为 1 fs. 模拟过程中温度和压力的控制采用 Anderson 等^[17] 和 Parrinello 等^[18] 方法, 范德华(vdw)和静电作用(Coulomb)分别用 atom-based^[19] 和 Ewald^[20] 方法, 截断半径取 9.5×10^{-10} m, 并进行截断尾部校正. 模拟的时间根据需求和精度要求确定, 通常在 0.1~1 ns. 全部计算在 Pentium IV 微机上完成. 在 NVT 系综下, 还分别设定 245, 295, 345, 395, 445 和 495 K 温度, 类似地完成 HMX/TATB 混合体系的 MD 模拟.

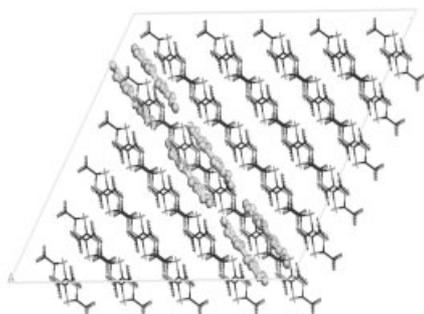


图 1 HMX/TATB 混合体系的初始构型

Figure 1 Initial model of HMX/TATB composite

1.2 静态力学分析

由弹性力学^[21]知, 应力与应变的最一般关系即广义胡克定律为:

$$\begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \\ \tau_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_z \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \\ \gamma_{xy} \end{bmatrix}$$

其中 C_{ij} 是 6×6 弹性系数矩阵元, 共 36 个. 原则上讲, 材料的所有力学性质均可从它的弹性系数矩阵导出. 由于弹性应变能的存在, 使得 $C_{ij} = C_{ji}$, 因此即使对于极端各向异性体, 也只有 21 个独立的弹性系数. 随着物体对称性的提高, 独立的弹性系数减少. 对于各向同性体, 只有两个独立的弹性系数 C_{11} 和 C_{12} . 为简洁计, 令 $C_{12} = \lambda$, $C_{11} - C_{12} = 2\mu$, λ 与 μ 称为拉梅系数(Lame constant). 拉伸模量 E 、泊松比 γ 、剪切模量 G 和体积模量 K , 均可用 λ 和 μ 表示:

$$E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu}, \quad \gamma = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}, \quad G = \mu, \quad K = \lambda + \frac{2}{3}\mu$$

即用两个拉梅系数便可求得各向同性体系的模量和泊松比.

对 MD 模拟所得体系的平衡运动轨迹, 基于静态力学分析原理求得弹性系数后, 在假设所模拟宏观体系为各向同性的条件下, MS 程序输出弹性模量和泊松比.

2 计算结果和讨论

2.1 力场的选择和体系平衡的判别

为检验 COMPASS 力场对本文体系的适用性, 我们用分子力学(MM)和分子动力学(MD)方法, 将优化后的晶胞参数和密度与实验值进行比较, 来判定力场的适用性.

表 1 给出 HMX 和 HMX/TATB 晶胞参数和密度的初始输入值以及 COMPASS 力场下的 MM 和 MD 优化值. 由表 1 可见, 优化后的晶胞参数和密度值与实验值符合很好, 晶胞参数改变很小, 密度相对误差小于 5%, 可见 COMPASS 力场对 HMX 和 HMX/TATB 体系有很好的适用性.

体系平衡必须同时达到温度和能量的平衡. 以 295 K 时 NPT 系综下 HMX/TATB 混合体系的 MD 模拟为例, 图 2 示出其温度平衡曲线. 从该图可见, 温度上下波动

表 1 HMX 和 HMX/TATB 晶胞参数的初始值和 MM, MD 优化结果

Table 1 Original, MM and MD optimized lattice parameters for HMX and HMX/TATB crystal

晶胞参数	HMX			HMX/TATB		
	输入值 ^a	MM	MD	输入值	MM	MD
$a/\text{\AA}$	6.54	6.46	6.56	32.70	32.19	32.31
$b/\text{\AA}$	11.05	10.33	10.63	33.15	32.20	32.42
$c/\text{\AA}$	8.70	8.96	9.11	26.10	26.35	26.85
$\alpha/(\text{^\circ})$	90.00	90.00	90.00	90.00	90.25	90.28
$\beta/(\text{^\circ})$	124.30	123.50	123.71	124.30	123.74	123.38
$\gamma/(\text{^\circ})$	90.00	90.00	90.00	90.00	89.74	89.82
密度/ $(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	1.89	1.97	1.86	1.75	1.83	1.73
相对误差/%	0.0	4.2	1.6	0.0	4.6	1.1

^a HMX 的输入值即实验晶胞参数.

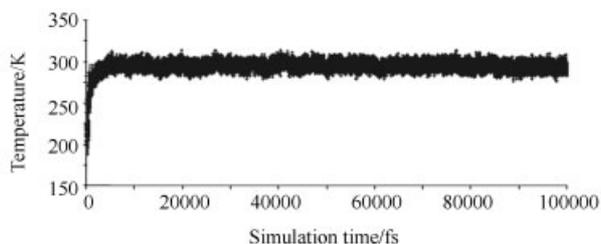


图 2 温度随模拟时间变化的曲线图

Figure 2 Temperature vs. simulation time

约为 ± 20 K 左右, 表明已达到温度平衡. 图 3 给出能量随模拟时间波动曲线, 由该图可见, 体系能量波动亦渐趋平缓, 能量偏差也较小, 表明该混合体系已达能量平衡. 类似地该混合体系在 NVT 系综下, 经 0.1 ns MD 模拟也已达到温度和能量平衡. 体系达到平衡后, 再经 0.2~1 ns MD 模拟, 每 0.02 ps 收集一次体系内各原子的运动轨迹, 保存全轨迹, 共收集若干帧轨迹文件. 图 4 给出在 NPT 和 NVT 系综下, 分别经 MD 模拟后的 HMX/TATB 混合体系平衡构型. 比较图 4 和图 1, 与初始结构晶体理想规则结构相比, 经 MD 模拟后的混合体系发生了变形, 这主要归因于 TATB 和 HMX 的分子间相互作用. 从图 4 可见, TATB 分子和距 TATB 分子较近的 HMX 分子变形较大, 而相隔较远的 HMX 分子及其层状结构几乎不变, 说明作用主要发生在两类分子交界

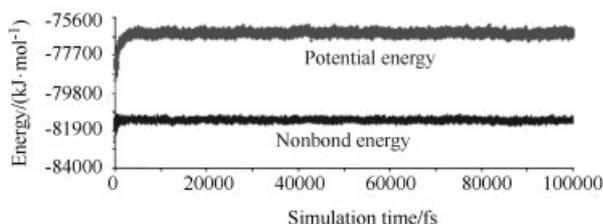


图 3 能量随模拟时间波动曲线图

Figure 3 Energy vs. simulation time

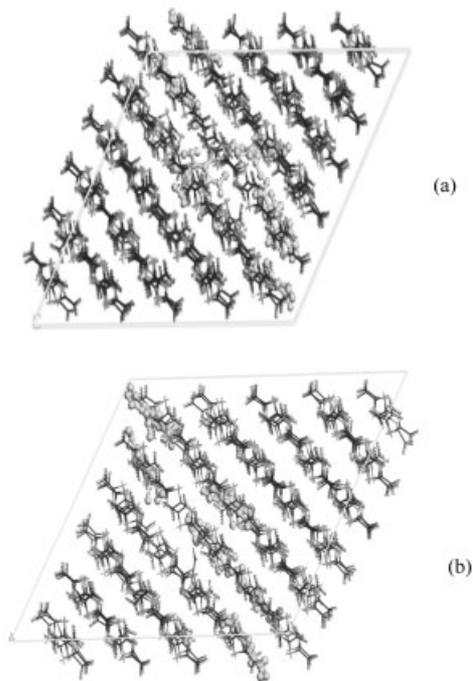


图 4 HMX/TATB 在 NPT (a) 和 NVT (b) 系综下的 MD 模拟结构

Figure 4 Structure of HMX/TATB after MD simulation in NPT (a) and NVT (b) ensemble

处. 从图 4 测得 TATB 和 HMX 的邻近原子间距在 2.2 至 3.4 \AA , 属于分子间相互作用范围, 包括氢键和范德华作用.

2.2 HMX/TATB 的弹性性能

表 2 列出了纯 β -HMX 和 HMX/TATB 在 NVT 和 NPT 系综下 MD 模拟所得弹性性能. 为便于比较, 表中还给出了主体炸药纯 β -HMX 弹性性能的实验值^[22]和 Thomas 等^[23]的模拟结果. 由表 2 可见, 对于纯 β -HMX 弹性性能, Thomas 等^[23]以自己的 MD 方法求得的结果较实验值^[22]系统地偏大; 而本文以通用的 MS^[13]程序和先进的 COMPASS 力场^[16]求得的结果则较为接近实验值; 不过表中所有纯 β -HMX 的结果均处于同一数量级且差别不大, 亦即均属合理的可以接受的范围.

从表 2 还可见, 在 NVT 系综下模拟所得数据均较 NPT 系综下的相应结果大. 这可能归因于 NVT 系综在模拟过程中, 体系变形较小, 密度保持不变; 而 NPT 系综在模拟过程中体积发生变化, 导致密度改变, 体系变形较大^[24]. 图 4 正反映出这一状况.

从表 2 弹性系数可见, 除对角矩阵元 C_{ii} 和 C_{12} , C_{13} , C_{23} 共 9 个矩阵元外, 其余值均接近为 0, 可见所模拟的纯 β -HMX 和 HMX/TATB 混合体系均可近似为正交各向异性弹性体^[21].

由表 2 知, 与纯 β -HMX 晶体相比, 无论是 NVT 还

表 2 纯 HMX 和 HMX/TATB 在 295K 的弹性性能(GPa)
Table 2 Elastic properties of pure HMX and HMX/TATB at 295 K (in GPa)

	Pure HMX ^[22]	Pure HMX ^[23]	Pure HMX (NVT)	Pure HMX (NPT)	HMX/TATB (NVT)	HMX/TATB (NPT)
C_{11}	18.4	22.2	17.6	12.8	11.3	9.2
C_{22}	14.4	23.9	12.5	10.9	7.8	7.8
C_{33}	12.4	23.4	16.5	11.4	10.0	8.9
C_{44}	4.8	9.2	7.6	5.9	4.3	4.0
C_{55}	4.8	11.1	4.6	4.6	3.2	3.2
C_{66}	4.5	10.1	5.6	4.8	3.3	3.4
C_{12}	6.4	9.6	4.9	3.4	2.5	1.8
C_{13}	10.5	13.2	6.3	4.9	3.7	3.1
C_{23}	6.4	13.0	7.5	5.2	3.6	3.2
C_{15}	-1.1	-0.1	-0.5	-0.4	0.6	0.4
C_{25}	0.8	4.7	-3.4	-2.7	-1.3	-1.4
C_{35}	1.1	1.6	-1.4	-0.4	0.3	0.5
C_{46}	2.7	2.5	-2.6	-1.8	-0.4	-0.7
拉伸模量			11.9	9.2	8.1	7.3
泊松比			0.3	0.3	0.2	0.2
体模量	9.6	15.1	9.3	6.9	5.4	4.7
剪切模量	3.1	7.0	4.6	3.6	3.2	3.0
拉梅弹性系数 λ			6.2	4.5	3.3	2.7
拉梅弹性系数 μ			4.6	3.6	3.2	3.0

是 NPT 系综下 HMX/TATB 混合体系的弹性系数和拉伸模量、体模量、剪切模量均系统地有所下降。模量减小, 表明材料刚性减弱, 同时弹塑性增强、脆性降低。泊松比是横向应变与纵向应变之比, 表 2 中所列泊松比多为 0.2~0.3, 处于塑料的数值范围。在我们模拟的混合体系中, TATB 的含量只占 6.3%, 与实际混合炸药中添加物与基炸药之重量比相符。由此可见, TATB 作为添加剂少量混入 HMX 炸药, 对其弹性性能有所改善。

2.3 HMX/TATB 在不同温度下的弹性性能

表 3 列出 HMX/TATB 混合体系在 245, 295, 345, 395, 445 和 495 K 温度下进行 NVT 系综下 MD 模拟所得弹性系数和各向同性弹性性能。

从表 3 知, 在 245~345 K 范围内, 随温度升高, 各 HMX/TATB 的弹性系数和模量无明显变化, 表明材料在这一温度范围内的刚性和弹性变化很小。当温度升至 395 K 时, 弹性系数和模量均呈减小趋势, 表明材料刚性逐渐减小, 弹性逐渐增强。从表 3 还可见, 泊松比几乎不随温度的变化而变化。通常塑料的泊松比为 0.2~0.4, 可见混合体系已具塑料的某些性质。

2.4 温度对 HMX/TATB 混合体系结合能的影响

某温度下 HMX 和 TAB 的相互作用能, 等于该温度下 HMX/TATB 平衡结构的总能量, 减去除掉 TATB 分子后该结构下的 HMX 能量, 再减去除掉 HMX 后 TATB 在该构型下的能量。定义结合能为分子间相互作用能的负值。结合能对混合炸药的力学和爆炸性能都具有重要影响。

从表 4 和图 5 可见, 随温度变化 HMX/TATB 混合体系的结合能呈复杂的变化趋势。先随温度升高而升高, 在 395 K 时最高, 而后又随温度升高而缓慢下降。这可能因为, 随温度升高分子动能增大, 混合体系的总能量和 HMX, TATB 的能量均随之升高, 但混合体系的总能量升幅较小, 所以结合能呈增大趋势。而当温度达到 395 K 后, 各体系能量增幅均减缓, 使结合能呈平稳变化。

3 结论

通过对 HMX/TATB 混合体系在不同系综和不同温度下的弹性性能和结合能的 MD 模拟研究, 可得如下结

表 3 HMX/TATB 在 NVT 系综下不同温度的 MD 弹性性能 (GPa)

Table 3 Elastic properties of HMX/TATB in NVT ensemble at different temperatures (in GPa)

	245 K	295 K	345 K	395 K	445 K	495 K
C_{11}	11.3	11.3	11.4	11.1	10.6	11.0
C_{22}	7.8	7.8	7.7	6.6	6.7	6.9
C_{33}	9.9	10.0	10.2	9.5	9.3	9.6
C_{44}	4.3	4.3	4.2	3.8	3.5	3.8
C_{55}	3.2	3.2	3.3	3.1	3.0	3.0
C_{66}	3.5	3.3	3.3	3.0	3.1	3.2
C_{12}	2.4	2.5	2.4	2.3	2.2	2.9
C_{13}	3.5	3.7	3.6	3.4	3.5	3.9
C_{23}	36	3.6	3.6	3.3	3.1	4.0
C_{15}	0.7	0.6	0.7	0.4	0.7	0.3
C_{25}	-1.3	-1.3	-1.3	-1.3	-1.1	-1.2
C_{35}	0.3	0.3	0.3	-0.1	0.2	0.2
C_{46}	-0.5	-0.4	-0.5	-0.4	-0.3	-0.5
拉伸模量	8.1	8.1	8.2	7.5	7.3	7.2
泊松比	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.3
体模量	5.4	5.4	5.4	5.0	4.9	5.4
剪切模量	3.2	3.2	3.3	3.0	2.9	2.8
拉梅弹性系数 λ	3.2	3.3	3.2	3.0	3.0	3.6
拉梅弹性系数 μ	3.2	3.2	3.3	3.0	2.9	2.8

表 4 HMX/TATB 在 NVT 系综下不同温度的结合能

Table 4 Bind energy of HMX/TATB in NVT ensemble at different temperatures

T/K	245	295	345	395	445	495
结合能/(kJ·mol ⁻¹)	682.1	845.0	1063.4	1154.2	1128.5	1091.2

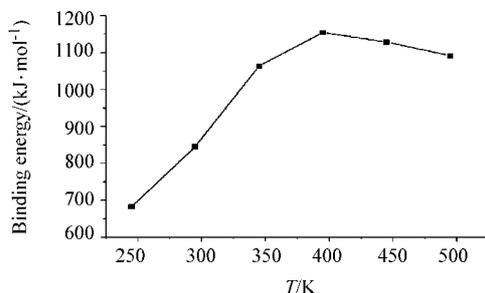


图 5 在 NVT 系综下 HMX/TATB 不同温度的结合能

Figure 5 Bind energy of HMX/TATB in NVT ensemble at different temperatures

论:

(1) 首次报道了 HMX/TATB 二元混合体系的 MD

模拟弹性系数和有效各向同性弹性性能。

(2) 与纯 HMX 相比, HMX/TATB 混合体系的模量减小, 弹性性能有所改善。

(3) 在 NPT 和 NVT 系综下, MD 模拟所得结果有所不同, 但呈平行一致递变趋势。

(4) 在 245~345 K 温度范围内, HMX/TATB 混合体系的刚性和弹性变化很小, 而在 395 K 以上, 体系的刚性减弱, 弹性增强。

(5) HMX/TATB 混合体系在 245~495 K 温度范围的结合能呈先升后降变化趋势。

References

- Sun, G.-X. *Macromolecule Mixed Explosive*, National Defence Industry Press, Beijing, **1984** (in Chinese). (孙国祥, 高分子混合炸药, 国防工业出版社, 北京, **1984**.)
- Dong, H.-S.; Zhou, F.-F. *Performance of High Energetic Explosive and Related Compounds*, Science Press, Beijing, **1989** (in Chinese). (董海山, 周芬芬, 高能炸药及相关物性能, 科学出版社, 北京, **1989**.)
- Sun, Y.-B.; Hui, J.-M.; Cao, X.-M. *Military Mixed Explosive*, The Publishing House of Ordnance Industry, Beijing, **1995** (in Chinese). (孙业斌, 惠君明, 曹欣茂, 军用混合炸药, 兵器工业出版社, 北京, **1995**.)
- Xiao, H.-M.; Ju, X.-H. *Intermolecular Interactions in Energetic Systems*, Science Press, Beijing, **2004** (in Chinese). (肖鹤鸣, 居学海, 高能体系中的分子间相互作用, 科学出版社, 北京, **2004**.)
- Xiao, H.-M.; Li, J.-S.; Dong, H.-S. *J. Phys. Org. Chem.* **2001**, *14*, 644.
- Li, J.-S.; Xiao, H.-M.; Dong, H.-S. *Explosion and Shock Wave* **2000**, *20*, 221 (in Chinese). (李金山, 肖鹤鸣, 董海山, 爆炸与冲击, **2000**, *20*, 221.)
- Xiao, J.-J.; Fang, G.-Y.; Ji, G.-F.; Xiao, H.-M. *Chin. Sci. Bull.* **2005**, (1), 21.
- Xiao, J.-J.; Gu, C.-G.; Fang, G.-Y.; Zhu, W.; Xiao, H.-M. *Acta Chim. Sinica* **2005**, *63*(6), 439 (in Chinese). (肖继军, 谷成刚, 方国勇, 朱伟, 肖鹤鸣, 化学学报, **2005**, *63*(6), 439.)
- Ma, X.-F.; Xiao, J.-J.; Yin, K.-L.; Xiao, H.-M. *Chin. J. Chem. Phys.* **2005**, *18*(1), 55 (in Chinese). (马秀芳, 肖继军, 殷开梁, 肖鹤鸣, 化学物理学报, **2005**, *18*(1), 55.)
- Huang, Y.-C.; Hu, Y.-J.; Xiao, J.-J.; Yin, K.-L.; Xiao, H.-M. *Acta Phys.-Chim. Sin.* **2005**, *21*(4), 425 (in Chinese). (黄玉成, 胡应杰, 肖继军, 殷开梁, 肖鹤鸣, 物理化学学报, **2005**, *21*(4), 425.)
- Xiao, J.-J.; Huang, Y.-C.; Hu, Y.-J.; Xiao, H.-M. *Sci China Ser. B* **2005**, *35*(3), 194.

- 12 Ma, X.-F.; Xiao, J.-J.; Huang, H.; Zhu, W.; Li, J.-S.; Xiao, H.-M. *Acta Chim. Sinica* **2005**, *63*(22), 2037 (in Chinese). (马秀芳, 肖继军, 黄辉, 朱伟, 李金山, 肖鹤鸣, 化学学报, **2005**, *63*(22), 2037.)
- 13 *Material Studio 3.0*, Discover/Accelrys, San Diego, Ca, **2004**.
- 14 Cady, H. H.; Larson, A. C. *Acta Crystallogr.* **1965**, *18*, 485.
- 15 Chang, S. C.; Henry, P. B. *Acta Crystallogr. B* **1970**, *26*, 1235.
- 16 Sun, H. *J. Chem. Phys. B* **1998**, *102*, 7338.
- 17 Andersen, H. C. *J. Chem. Phys.* **1980**, *72*, 2374.
- 18 Parrinello, M.; Rahman, A. *J. Chem. Phys.* **1982**, *76*, 2662.
- 19 Tosi, M. P. *Solid State Phys.* **1964**, *16*, 107.
- 20 Ewald, P. P. *Ann. Phys.* **1921**, *64*, 253.
- 21 Wu, J.-L. *Mechanics of Elasticity*, Tongji University Press, Shanghai, **1993** (in Chinese). (吴家龙, 弹性力学, 同济大学出版社, 上海, **1993**.)
- 22 Lewis, L. S.; Craig, J. E. *J. Chem. Phys.* **2005**, *122*(17), 174701-1
- 23 Thomas, D. S.; Ralph, M.; Dmitry, B.; Grant, D. S. *J. Chem. Phys.* **2003**, *119*(14), 7417.
- 24 Wu, X.-H.; Xiang, J.-Z. *Modern Materials Computation and Design Tutorial*, Publishing House of Electronics Industry, Beijing, **2002** (in Chinese). (吴兴惠, 项金钟, 现代材料计算与设计教程, 电子工业出版社, 北京, **2002**.)

(A0510118 LU, Y. J.)