



2012年版

中国工程物理研究院 科技年报

Annual Report of China Academy of Engineering Physics



• 中国原子能出版社 •

11313-54
20001
2012

2012 年版

中国工程物理研究院

科技年报

Annual Report of

China Academy of Engineering Physics



编辑部通讯地址

四川省绵阳市 919 信箱 805 分箱

邮编: 621900

电话: (0816) 2485754, 2485793

传真: (0816) 2485753

E-mail: HPLPB@caep.ac.cn

URL: www.caep.cetin.net.cn

中国原子能出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

中国工程物理研究院科技年报:2012 年版/《中国工程物理研究院科技年报》编辑部编. — 北京:中国原子能出版社, 2012.12

ISBN 978-7-5022-5758-3

I. 中… II. 中… III. ①工程物理学—中国—2012—年报 IV. ①TB13-54

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2012) 第 257786 号

内容简介

本书主要介绍 2011 年度中国工程物理研究院在物理、力学与数学、化学与材料科学和信息科学与电子工程等重点学科与研究领域的部分科研进展与科研成果, 这些内容采用专稿形式, 充分体现了科研特色, 展示了科研能力。本书还介绍了 2011 年度中国工程物理研究院科研人员申请的国家自然科学基金资助项目、科研人员在全国性学会中部分任职情况以及当年度硕、博士论文题目, 并选介中国工程物理研究院组织或参加的国际国内学术交流活动。

本书旨在加强与国内外同行之间的交流与合作, 并可供从事科学研究与管理的有关部门和科技人员、高等院校师生参考。

中国工程物理研究院科技年报/2012 年版

出版发行 中国原子能出版社 (地址: 北京市海淀区阜成路 43 号 邮编: 100048)

责任编辑 付 真

特约编辑 李天惠

印 刷 四川绵阳科学城曙光印刷厂

经 销 全国新华书店

开 本 880 mm×1230 mm 1/16

字 数 418 千字

印 张 11.875

版 次 2012 年 12 月第 1 版 2012 年 12 月第 1 次印刷

书 号 ISBN 978-7-5022-5758-3

印 数 1—1 000 定 价 100.00 元

版权所有 侵权必究 出版社网址: <http://www.aep.com.cn>

《中国工程物理研究院科技年报》

第五届编审委员会

主 任 彭先觉

副主任 汪小琳 赵武文

委 员 (以姓氏笔画为序)

王 韬	帅茂兵	叶春福	田 忠	李正宏	李敬明
肖世富	何建国	何铁宁	何朝晖	应阳君	张 凯
张 健	张传飞	张保汉	范国滨	杨礼兵	罗文华
孟凡宝	赵 锋	赵成杰	胡海波	莫 军	席传裕
黄秀光	隋 展	曾 超	魏智勇		

编辑部 李天惠 刘 剑

第三届 国际感应加速器专题研讨会



2011年10月17—20日,由中国脉冲功率技术及应用学会主办,中国工程物理研究院科学技术协会和中国加速器学会协办,中国工程物理研究院流体物理研究所承办的第三届国际感应加速器专题研讨会在都江堰召开。本届会议参会人员共40余人,分别来自美国劳伦斯·利弗莫尔国家实验室(Lawrence Livermore National Laboratory, LLNL)、日本高能加速器研究机构(High Energy Accelerator Research Organization, KEK)、日本东京工业大学(Tokyo Institute of Technology, TIT)、日本东京城市大学(Tokyo City University, TCU)、复旦大学,中国科学院近代物理研究所,成都锦江电器制造有限公司,中国工程物理研究院流体物理研究所等国内外著名实验室、大学。来自国外的专家共8人,国内代表30余人。本次会议共交流论文18篇,均进行了口头报告。

第六届 全国青年计算物理学术会议

2011年8月16—20日在山西太原召开了“第六届全国青年计算物理学术交流会”。本次会议由北京应用物理与计算数学研究所、北京计算科学研究中心、复旦大学物理系、中国工程物理研究院、中国科学院物理研究所和中国人民大学物理系共同组织，由北京应用物理与计算数学研究所、中国人民大学物理系、北京计算科学研究中心和中国工程物理研究院资助，并由北京应用物理与计算数学研究所计算物理国家级重点实验室和山西大学承办。来自国内外的科研人员和学生100余人参加了会议。



目次 2012

Annual Report of China Academy of Engineering Physics

院长致辞.....	赵宪庚	1
专题		
钪氧化物特性的第一性原理研究进展.....		3
物理学科		
未反应炸药冲击绝热关系研究进展.....	傅 华	13
铜系氧化物物理性质理论研究进展.....	耿华运	15
延性金属层裂的研究进展.....	裴晓阳	18
多孔脆性介质冲击波压缩破坏的细观图像.....	王文强	21
基于反积分方法的准等熵压缩实验数据分析.....	张红平	24
Z 箍缩等离子体电流分布研究.....	周 林	27
D ⁺ 离子束致钪靶择优烧熔物理效应的研究.....	王博宇	30
基于单能成像技术的内爆压缩过程测量方法研究.....	陈伯伦	33
强激光加载下金属材料微喷回收诊断.....	辛建婷	36
基于纳米结构的偶次谐波的产生.....	郭世方	39
钝感炸药点火增长模型的欧拉数值模拟.....	郝鹏程	42
驱动激光束间相干性对背向散射的影响研究.....	王 琛	45
力学与数学学科		
强冲击加载下金属样品表面微喷及微层裂现象研究.....	陈永涛	49
固体炸药的磁驱动准等熵压缩特性研究.....	王桂吉	52
高 g 值宽脉冲加载实验装置研制.....	陈 刚	55
超精密离子束抛光机床研制.....	吉 方	58
金刚石刀具精密研抛机理与工艺技术研究.....	雷大江	61
“神光III”主机装置空间滤波器的制造和装调关键技术.....	连克难	63
铝合金/钛合金异种金属的电子束熔-钎连接技术.....	王亚荣	66
高功率激光薄膜研究进展.....	罗 晋	69
基于声速分布的网格松弛方法及其应用.....	戴自换	72
基于 CE/SE 方法的气固两相爆轰数值模拟程序.....	董贺飞	75
混合并行编程模型下的接触问题并行计算.....	肖永浩	79
面向辐射屏蔽优化设计的虚拟仿真研究进展.....	郑 澎	82
化学与材料学科		
探针-炸药相互作用力用于单质炸药识别研究.....	程克梅	87
聚氨酯固-固相变储能材料的研究.....	高 毅	90

低比压条件对炸药浇铸成型质量的影响.....	黄 勇	94
层片状铈酸材料的制备及其催化性质.....	杨志剑	96
无机填料与纤维复合改性聚乳酸及其改性机理研究.....	余凤湄	99
贮存 LiH 的放氢原理和钝化研究.....	褚明福	102
二氧化碳对钽钼合金膜透氢性能的影响.....	陆光达	105
氢同位素气体的拉曼光谱测量技术初探.....	吕俊波	108
高温传质陶瓷离子传输机制研究.....	孟建波	111
钪氮化物电子结构的理论模拟.....	史 鹏	114
室温熔盐镀铝制备阻氧涂层新方法的研究进展.....	张桂凯	116
金属铀表面 Cr/CrN 多层膜的制备与性能研究.....	朱生发	118
球形冷冻靶充气/冷冻与均化研究进展.....	雷海乐	121
第一原理研究 sp^2 杂化对类金刚石薄膜摩擦性能的影响.....	王丽莉	124
炸药熔铸过程数值模拟研究.....	谢志毅	127

信息科学与电子工程学科

0.2S 级测量准确度的全光纤电流互感器研制进展.....	李建中	133
快前沿 Mini-Marx 发生器研制.....	梁 川	136
高功率重复频率光导开关技术研究进展.....	刘宏伟	139
0.14 THz 超高分辨成像雷达实验研究.....	成彬彬	142
高功率毫米波 TE_{01} - TE_{11} 模式变换器的研究.....	赫英毅	145
2 Gbps 16QAM 高速通信解调技术.....	林长星	148
光参量啁啾脉冲放大技术研究进展.....	曾小明	150
基于智能数据压缩的时变数据场体绘制算法.....	曹 轶	154
面向 TB 量级时变数据集的并行可视分析软件平台 TeraVAP	肖 丽	157
太赫兹量子级联激光器电子结构设计.....	杨 宁	160
强流相对论多注电子束的引出与传输技术研究.....	黄 华	162
高光束质量高功率大谐振腔固体激光技术研究.....	靳全伟	166
紧凑型模块化重频脉冲功率源研制.....	谭 杰	168
高能固体激光系统光束质量主动控制技术研究.....	向汝建	171
数据集中安全存储平台研制.....	陈志文	174

附录 A 2011 年度国家自然科学基金资助项目.....	179
附录 B 2011—2012 年度中国工程物理研究院在全国性学会中部分任职情况.....	181
附录 C 2011 年硕士、博士研究生毕业论文题录.....	186



院长致辞

2012 年版院科技年报的五十多篇科技论文，较为集中地展示了院重要战略发展方向的年度基础研究进展和成果。其中，钷氧化物特性的第一性原理研究从密度泛函理论出发，在细致分析钷 5f 电子轨道特性的基础上，提出了钷氧化物特性的理论研究方案，开展了系统的第一性原理计算研究，获得了一系列创新性成果，证实了现有理论方案的有效性，为开展钷氧化问题的深入研究奠定了坚实基础。

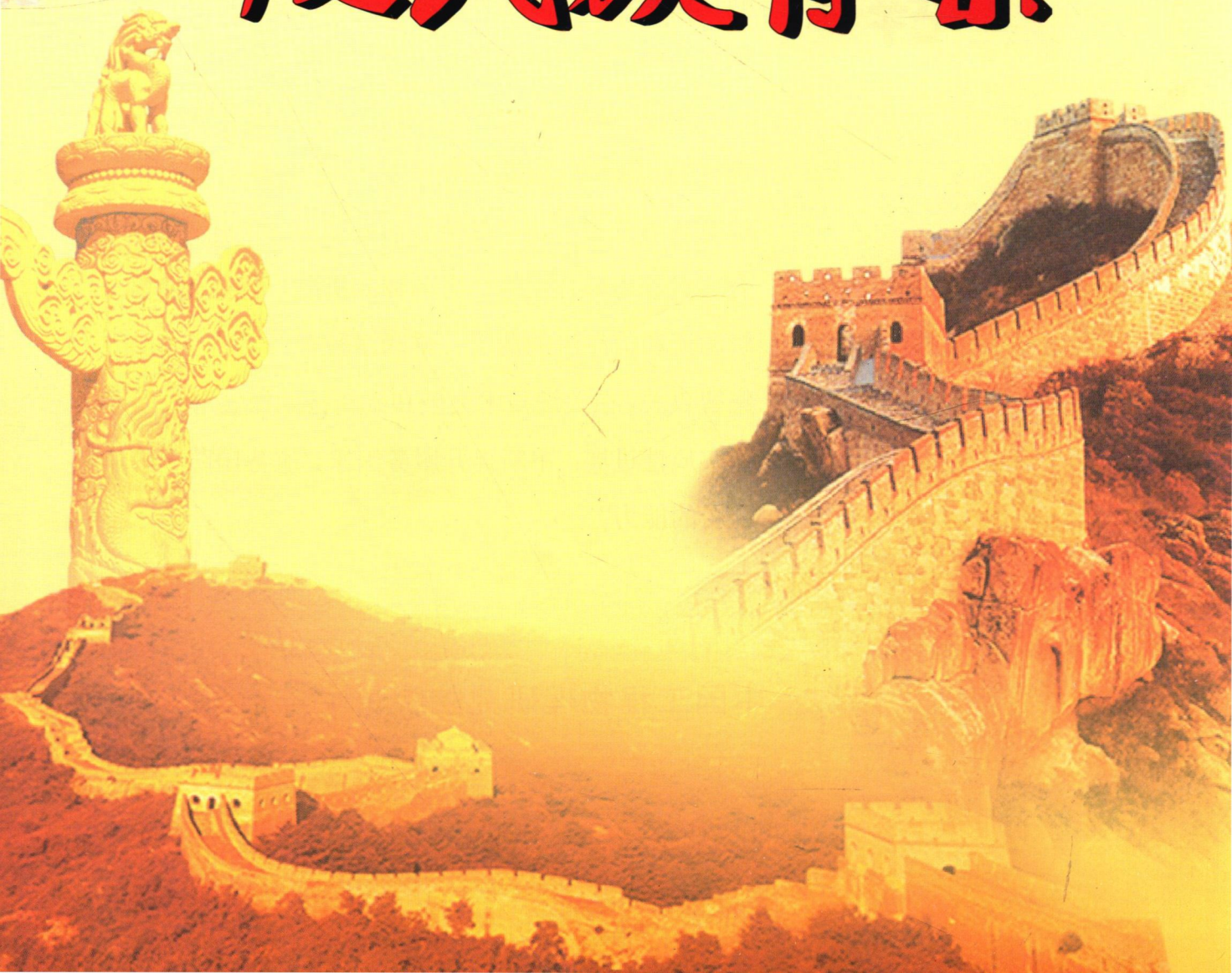
当前，我院正处于深入推进新时期发展战略的关键时期，需要一以贯之的决心、当仁不让的信心和排除万难的意志，建立健全激活原动力、增强外驱力、夯实竞争力和强化生命力的体制机制，打破人才流、资源流和信息流的藩篱，推动学科融合、协合创新、集智攻关，在关键技术突破和高新技术探索等方面取得实质性进展，不断提升服务国家、服务国防、服务社会的能力。

中国工程物理研究院院长

赵贞俊

中物院精神

铸国防基石 做民族脊梁



钷氧化物特性的 第一性原理研究进展

张 平, 杨 宇, 孙 博, 赵宪庚

钷的物理性质、力学性能、化学活性及核反应能力在锕系元素乃至整个元素周期表中显得最不寻常和最为复杂, 在基于电子及原子层次的基础研究领域居于前沿, 挑战着人类在完整和自洽认识重核材料基本物性上所能达到的理论建模和实验探测水平。钷活性很强, 很容易与环境中的氧气反应, 生成 PuO_2 、 Pu_2O_3 等表面氧化物。充分认识和理解这些表面氧化物的特性, 特别是从量子力学水平上揭示钷的 5f 电子轨道的巡游性、局域关联性、自旋-轨道耦合、化学键的方向性和各向异性等相互竞争的多样性及其在氧化过程中的成键性质和相应的能谱特征, 是钷科学研究领域的一项重要重要基本研究目标。

近年来, 我们从密度泛函理论(DFT)出发, 在细致分析钷的 5f 电子轨道在氧化过程中扮演的离域-局域双重角色后, 提出了有效研究钷氧化物特性的设想, 要点包括: (1) 钷和钷氧化物的 5f 电子特征差别很大, 需要采用不同的理论方案来区别处理; (2) 对于金属钷来说, 由于其 5f 电子强烈的局域强关联效应及其金属键中表现出来的显著动态电荷涨落现象, 因此一个合适的理论方案是: 首先对单个钷原子的 5f 电子的量子多体基态波函数进行深入、准确的构造性研究, 以此作为出发点, 再把金属钷中相邻钷原子间的 5f 电子多体波函数交叠作为微扰处理; (3) 对于钷氧化物来说, 理论处理则相反: 由于氧化物(特别是 PuO_2)中 Pu-O 键的离域性杂化效应很强, 电荷动态涨落效应很小, 因此从密度泛函能带理论出发, 把 5f 电子之间的静态局域库仑作用作为微扰处理是合适的; (4) 由于钷氧化物中的动态电荷涨落效应很小, 因此不需要对其能谱做准粒子激发修正处理; (5) 与金属钷不同, 钷氧化物中的 5f 电子多重态效应较弱, 因此其相对论自旋-轨道耦合可暂时作为微扰处理。

我们对钷氧化物开展了系统的第一性原理计算研究, 获得了一系列基础性研究进展和成果, 主要包括以下四项内容。

1 率先采用 DFT+U 方案模拟获得了钷氧化物的电子性质

根据前述分析, 我们在国际上首先采用 DFT+U 理论方案系统研究了钷氧化物的基态电子结构和物理性质^[1,2], 这里 U 代表钷离子上的 Hubbard 电子-电子库仑作用参数。事实上, 在不考虑氧化物中 Pu 离子上 5f 电子之间的局域库仑排斥作用带来的能级修正时, 通常的 LDA 或 GGA 等基于自由电子交换关联势的密度泛函理论无法正确描述钷氧化物的电子结构。作为例子, 图 1 展示了 PuO_2 的电子分波局域态密度。可以看到, 单纯的 DFT 理论描述 PuO_2 时, 给出的是非物理的金属态, 而考虑了局域关联修正后获得的 PuO_2 电子结构则显示出与实验吻合的绝缘体态。另外, 从图 1 展示的 DFT+U 计算结果中还可以看到氧离子的 2p 电子与钷离子的 5f 电子有显著的杂化效应,

表明它们间存在着较强的共价相互作用，这与实验也是吻合的。我们还发现，与 PuO_2 不同， $\text{Pu}_2\text{O}_3(\alpha)$ 中费米能级附近的占据态主要由钚离子的 5f 轨道提供，不涉及与氧离子 2p 轨道的杂化。进一步的电荷密度分析可以证实 Pu_2O_3 中钚离子和氧离子之间的共价结合要比 PuO_2 弱。

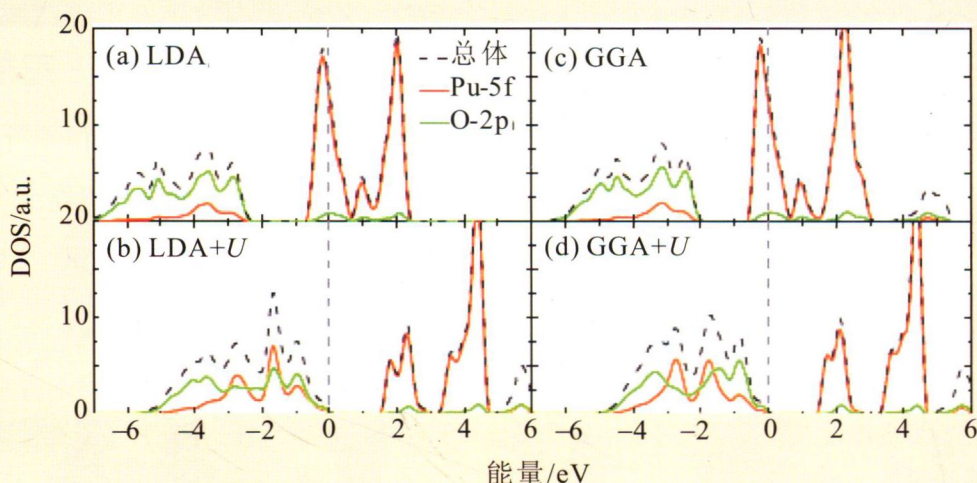
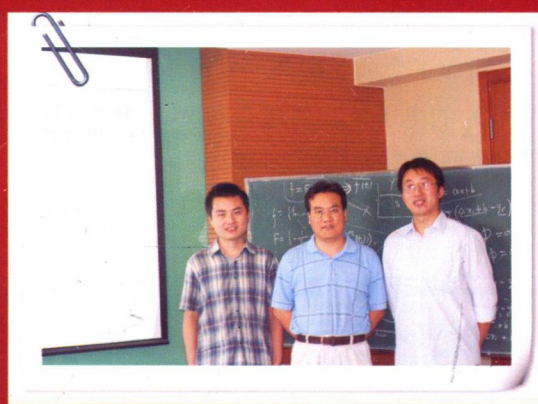


图1 PuO_2 的电子分波局域态密度

另外，为了与钚氧化物对比，我们还系统研究了 ThO_2 、 UO_2 、 NpO_2 的基态电子结构性质^[1-3]，显示了 Pu-O、U-O 和 Np-O 键比 Th-O 键具有更强的共价性，Th-O 键在四种锕系二氧化物中具有最强的离子性。这些结果在物理上是非常合理的。钚氧化物的 DFT+U 理论研究成果发表后，迅速引起了国际同行的广泛关注、引用及后续研究。例如，美国洛斯·阿拉莫斯国家实验室研究人员已将上述研究成果用于理解锕系氧化物中氧缺陷的协同行为(D. A. Anderson, et al. *Phys. Rev. B*, 2009, **79**: 024110)，他们还把我们总结获得的理论参数作为其进一步开展计算研究的依据；瑞典的研究人员已将我们的研究成果应用到 PuO_2 单晶 X 光吸收谱的实验测量(A. Modin, et al. *Phys. Rev. B*, 2010, **83**: 075113)；美国劳伦斯·利弗莫尔国家实验室的研究人员在最近的 MRS 会议上正面评价了我们的工作(P. Soderlind, et al. *MRS Bulletin*, 2010, **35**: 883)；美国劳伦斯·利弗莫尔国家实验室材料科学家 Kevin Moore 致信评价我们在锕系材料方面的计算工作^[1-18]“will prove to be very important in the next few years to decades”，等等。



2 理论上率先计算获得 PuO_2 及 UO_2 的光学性质

由于我们采用 DFT+ U 理论方案计算获得的钚氧化物的电子能带结构与光电子能谱实验结果相符, 再加上如前所述的该材料动态电荷涨落效应很小, 不需要对其能谱做准粒子激发修正处理, 由此很自然地, 我们进一步采用 DFT+ U 方案探讨了其光学性质^[4], 之前文献中并没有该方面的理论报道, 仅有关于 UO_2 光反射谱的实验报道。我们在 DFT+ U 框架内采用线性响应理论计算了 UO_2 和 PuO_2 的介电函数, 结果分别见图 2(a)和(b), 图中横轴表示光子能量, 纵轴表示介电函数的实部(ϵ_1)与虚部(ϵ_2)。为了比对, 图 2(a)中还给出了瑞士 Schoenes 等人通过测量 UO_2 的反射光谱给出的 UO_2 介电函数实验结果。可以看到, 我们的 UO_2 计算结果与实验结果吻合得相当好。图中介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 在 3 eV 以下的峰对应的是铀离子周围 5f 电子态内部的跃迁, 5~9 eV 的两个峰对应铀离子的 5f 电子向 6d 轨道的跃迁, 而 9~13 eV 的两个峰则对应氧的 2p 电子向铀的 6d 轨道的跃迁。对于 PuO_2 (见图 2(b)),

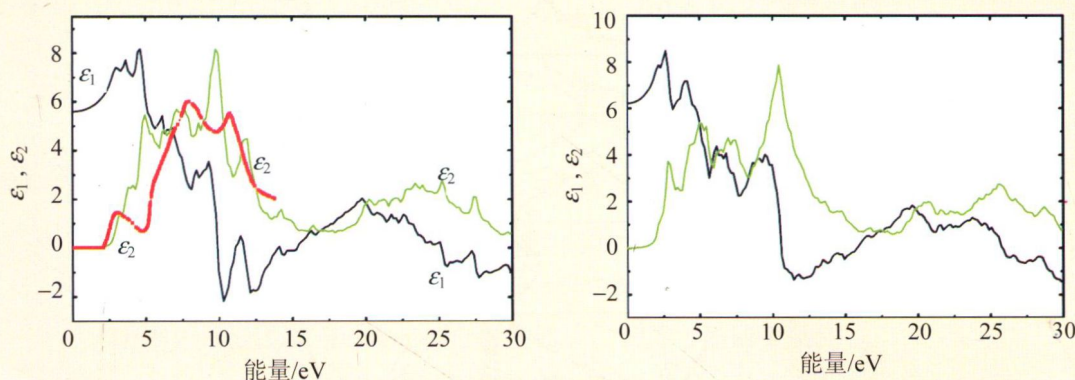


图 2 (a) UO_2 和(b) PuO_2 的介电函数实部(ϵ_1)与虚部(ϵ_2), 其中图(a)中的红线代表 UO_2 介电函数虚部的实验结果。

类似地, 介电函数虚部中 6 eV 以下的峰对应钚离子 5f 带内跃迁, 7 eV 附近的峰对应钚离子 5f 态与 6d 态间的跃迁, 而约 10 eV 的峰则对应氧离子 2p 态与钚 6d 态间的跃迁。

由于我们计算获得的 UO_2 的光学性质与实验吻合很好, 因此尽管我们的 PuO_2 光谱理论结果目前还缺乏实验的验证, 但是仍然获得了国际上一些钚科学实验工作者的信任。2010 年, 德国超铀元素研究所的材料学家在采用光学方法测量 PuO_2 的熔化温度时, 直接将我们关于 PuO_2 光学性质的理论结果作为他们判断 PuO_2 是否发生熔化的光学依据(F. D. Bruycker, et al. *Materials Today*, 2010, 13: 52); 美国洛斯·阿拉莫斯国家实验室研究人员在《Plutonium Futures—The Science 2010》会议上也重点提到了该工作。

3 理论计算的 PuO_2 声子谱最近获美国国家实验室测量证实

为了获得 PuO_2 的热力学性质, 如膨胀系数、比热容、德拜温度、热导率等, 我们进一步采用 DFT+ U 理论方案计算得到了 PuO_2 的声子谱, 并由此获得了 PuO_2 的一些热力学性质, 研究结果于 2010 年发表在《物理评论》上^[2]。然而由于 PuO_2 的声子谱之前一直未见实验报道, 因此我们一直不能确定我们的 PuO_2 声子谱理论结果(及相应的热力学参数计算结果)是否定量准确。令人鼓舞的是, 2012 年 4 月, 美国劳伦斯·利弗莫尔国家实验室联合阿贡国家实验室首次公开发表了 PuO_2 声

子谱的非弹性 X 射线散射实验测量结果(M. E. Manley, et al. *Phys. Rev. B*, 2012, **85**:132301)。他们将测量结果与我们的理论结果画在同一张图中,进行了严格比对(见图 3),比对结果显示我们的理论结果与实验测量符合相当好。这就为我们围绕铀氧化物特性开展的系列理论研究提供了最新实验支持,也为我们进一步的计算模拟提供了更大的信心。

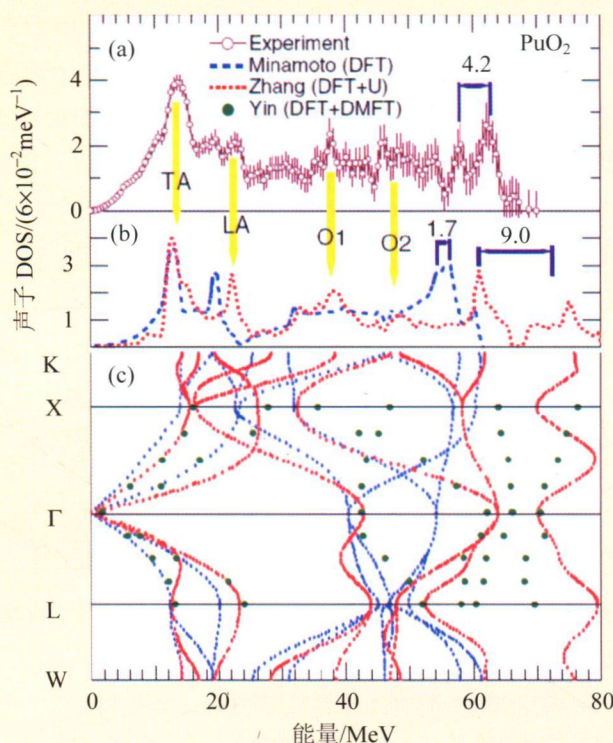


图 3 PuO₂ 声子谱的实验与理论对比(摘自 M. E. Manley, et al. *Phys. Rev. B*, 2012, **85**:132301)。

其中红色的点线是我们的理论结果)。

事实上,基于不同温度下的声子谱计算结果,我们已理论获得了 PuO₂ 的诸多热力学性质。例如,利用声子谱及包含声子谱贡献的不同温度下的自由能,获得了体积、德拜温度、体弹性模量以及反映非谐效应的格林艾森(Grüneisen)参数,在此基础上利用倒易声子散射近似计算得到了 PuO₂ 的热导率与材料温度的依赖关系,如图 4 所示。该热力学量已被美国西北太平洋国家实验室测量确定,也示意在图中。显然,我们的理论结果再次与实验吻合很好。

PuO₂ 声子谱及热力学性质的成功计算让我们把目光转向结构更为复杂的 α-Pu₂O₃,从理论上对其声子谱也进行了预测^[16]。与 PuO₂ 相比,我们发现 α-Pu₂O₃ 的声子谱中氧离子和铀离子的振动模式之间的带隙非常显著,而对于 PuO₂ 来说,氧离子和铀离子的振动模式存在比较小的交叠。这表明 α-Pu₂O₃ 中 Pu 和 O 之间的相互作用要比 PuO₂ 中的弱。考虑到 α-Pu₂O₃ 原胞可以通过 2×2×2 的 PuO₂ 超胞去掉 25% 的 O 原子得到, O 原子的减少非但不会减小体积,反而使得体积膨胀约 7%,这表明, α-Pu₂O₃ 中 Pu 和 O 之间的共价相互作用确实要比 PuO₂ 中的弱很多,因此我们的 α-Pu₂O₃ 声子谱结果总体是合理的。由于氧离子和铀离子间键合作用的减弱,代表 α-Pu₂O₃ 中氧离子振动的最高光学支声子,其振动频率也比二氧化铀中的最高光学支声子小了很多。我们期待给出的关于 α-Pu₂O₃ 的第一性原理声子谱在不久的将来也能得到实验的检验。

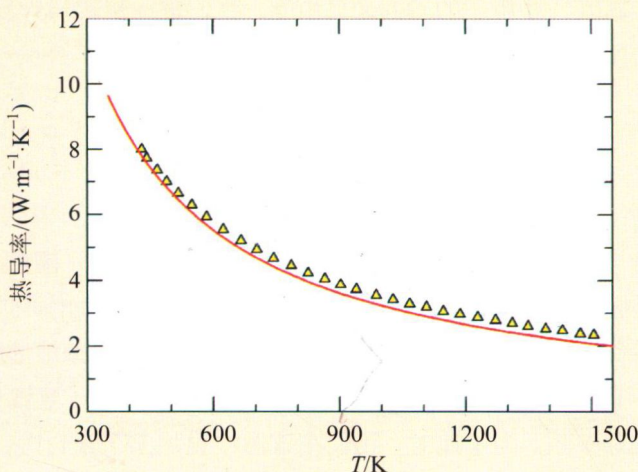
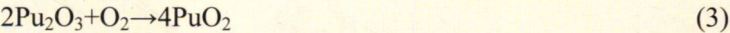
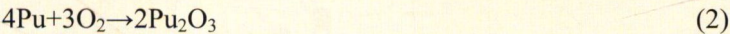


图 4 PuO₂ 的热导率

(其中实线是我们的理论结果，三角形实验数据来自美国西北太平洋国家实验室。)

4 理论计算的 PuO₂ 与 Pu₂O₃ 之间的热力学平衡关系与实验定量符合

获得了 PuO₂ 与α-Pu₂O₃ 的电子结构、第一性原理声子谱及相应的热力学性质后，我们随即开展了两种氧化物之间热力学平衡及氧化-还原转换关系的第一性原理研究工作。为此我们从两方面出发^[16,18]：一方面，通过变温 Helmholtz 自由能计算，获得下述四个反应



在不同温度下的反应能，结果见表 1。可以看到，随着温度的上升，反应式(1)，(2)和(4)的反应能绝对值是增大的，只有反应式(3)的反应能绝对值减小，这表明温度越高，金属钚越容易被氧化，而且温度越高越有利于低价态的 Pu₂O₃ 形成，即要使表面钚原子完全氧化成 PuO₂，低温下反应效果更好，但是此时氧化速率较慢。

表 1 金属钚表面氧化过程中四种反应在不同温度下的反应能 kJ/mol

反应	0 K		300 K		500 K		expt.*	
	Pu	O ₂	Pu	O ₂	Pu	O ₂	Pu	O ₂
Pu+O ₂ →PuO ₂	-883	-883	-893	-893	-902	-902	-1000	-1000
4Pu+3O ₂ →2Pu ₂ O ₃	-737	-982	-745	-993	-760	-1013	-791	-1055
2Pu ₂ O ₃ +O ₂ →4PuO ₂		-586		-577		-570		
Pu+3PuO ₂ →2Pu ₂ O ₃	-298		-312		-332			

另一方面，通过计算氧气环境下的 Gibbs 自由能，我们进一步定量计算了氧的化学势对钷氧化物化学配比的影响。在有限温度 T 和压强 p 的环境里，气态氧的化学势在理想气体近似下可以表示成

$$\mu_{\text{O}}(T, p)=1/2E_{\text{O}_2}+\mu_{\text{O}}(T, p_0)+1/2\ k_{\text{B}}T\ln(p/p_0) \tag{5}$$

其中， k_{B} 和 p_0 分别代表波尔兹曼常数和标准大气压。图 5(a)是我们计算获得的标准大气压下 PuO_2 材料的体积和氧空位形成能随着钷、氧化学配比的变化。可以看到，随着氧空位的增多， PuO_2 材料的体积不断增加，这表明氧空位的形成会削弱钷、氧离子间的成键作用，从而造成体积膨胀。氧空位的形成能也会随着氧空位的增多而不断增大，说明氧空位越来越难形成。含有氧空位的 PuO_2 材料可用 PuO_{2-x} 表示。图 5(b)给出了 3 个不同温度下，化学平衡时环境氧分压(对数坐标)与钷氧化物中原子化学配比的依赖关系。为了比对，我们在该图中也加上了来自美国 and 欧洲的实验结果。我们的理论结果与实验测量定量符合得相当好。这一连串的事实表明：可以在现有的 DFT+ U 第一性原理理论方案下有效研究和探讨钷科学领域中著名的钷氧化问题。

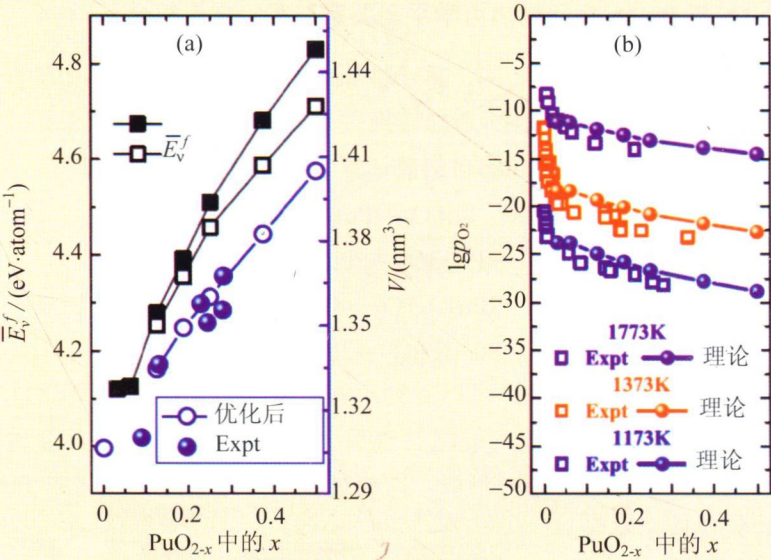


图 5 (a) 计算获得的标准大气压下， PuO_2 材料的体积和氧空位形成能与材料中钷、氧成分化学配比的依赖关系；(b) 计算获得的不同温度下， PuO_{2-x} 材料的化学配比与环境氧分压的依赖关系

参考文献:

- [1] Sun Bo, Zhang Ping, Zhao Xiangeng. First-principles LDA+*U* and GGA+*U* study of plutonium oxides[J]. *J Chem Phys*, 2008, **128**: 084705.
- [2] Zhang Ping, Wang Baotian, Zhao Xiangeng. Ground state properties and high pressure behavior of plutonium dioxide: Density functional theory calculations[J]. *Phys Rev B*, 2010, **82**: 144110.
- [3] Wang Baotian, Shi Hongliang, Zhang Ping, et al. First-principles LDA+*U* and GGA+*U* study of neptunium dioxide[J]. *Phys Rev B*, 2010, **81**: 045119.
- [4] Shi Hongliang, Chu Mingfu, Zhang Ping. Optical properties of UO₂ and PuO₂[J]. *J Nucl. Mater*, 2010, **400**: 151-156.
- [5] Wang Baotian, Shi Hongliang, Zhang Ping, et al. First-principles study of ground state properties and high pressure behavior of ThO₂ [J]. *J Nucl Mater*, 2010, **399**: 181-188.
- [6] Shi Hongliang, Zhang Ping, Li Shushen, et al. First-principles study of UC₂ and U₂C₃[J]. *J Nucl Mater*, 2010, **396**: 218-222.
- [7] Wang Baotian, Zhang Ping, Song Hongzhou, et al. Structural, mechanical, thermodynamic, and electronic properties of thorium hydrides from first principles[J]. *J Nucl Mater*, 2010, **401**: 124-129.
- [8] Lu Yong, Wang Baotian, Zhang Ping, et al. Structural, electronic, and thermodynamic properties of UN: Systematic density functional calculations[J]. *J Nucl Mater*, 2010, **406**: 218-222.
- [9] Wang Baotian, Zhang Ping. Ideal strengths and bonding properties of PuO₂ under tension[J]. *Chin Phys Lett*, 2011, **28**: 047101.
- [10] Lu Yong, Li Dafang, Zhang Ping, et al. Electronic structures, mechanical and thermodynamic properties of ThN from first-principles calculations[J]. *J Nucl Mater*, 2011, **408**: 136-141.
- [11] Lu Yong, Wang Baotian, Zhang Ping, et al. Structural, electronic, mechanical, and thermodynamic properties of UN₂: Systematic density functional calculations[J]. *J Nucl Mater*, 2011, **410**: 46-51.
- [12] Yang Yu, Zhang Ping, Shi Peng, et al. H₂ dissociation on the γ -U(100) surface and influences of niobium doping: A density functional theory study[J]. *J Phys Chem C*, 2011, **115**: 23381-23386.
- [13] Lu Yong, Yang Yu, Zhang Ping. Thermodynamic properties and structural stability of thorium dioxide[J]. *J Phys Condens Matter*, 2012, **24**: 225801.
- [14] Shi Hongliang, Zhang Ping. First-principles study of α -Pu₂O₃[J]. *J Nucl Mater*, 2012, **420**: 159-163.
- [15] Sun Bo, Zhao Xiangeng, Zhang Ping, et al. First-principles study of surface properties of PuO₂: Effects of thickness and O-vacancy on surface stability and chemical activity[J]. *J Nucl Mater*, 2012, **426**: 139-147.
- [16] Lu Yong, Yang Yu, Zhang Ping, et al. Phonon dispersion curves and thermodynamic properties of α -Pu₂O₃ [J]. arXiv: 1208.3746.
- [17] Zhang Yajuan, Yang Yu, Zhang Ping. Electronic, mechanical and thermodynamic properties of α -UH₃: A comparative study by using the LDA and LDA+*U* approaches[J]. *J Nucl Mater*, 2012, **430**: 137-141.
- [18] Sun Bo, Zhao Xiangeng, Zhang Ping, et al. Environmental dependence of redox energetics of PuO₂ and α -Pu₂O₃: A quantitative solution from DFT+*U* calculations[J]. *Phys Lett A*, 2012, **376**: 2672-2676.