

文章编号: 1006-9941(2013)02-0152-05

“量子炸药化学”及其拓展——评介几部学术著作的“序”和“前言”

肖鹤鸣, 朱卫华, 肖继军, 王桂香, 刘冬梅

(南京理工大学化工学院, 分子与材料计算研究所, 江苏 南京 210094)

摘要: 提供早先和当前已出版和即将出版几部学术著作的序和前言, 围绕“量子炸药化学”这一提法的含意及其拓展, 针对如何从事相关理论研究和如何评价学术论文等问题, 加以注释和阐述, 以利促进含能材料计算学的发展。

关键词: 量子炸药化学; 含能材料计算学; 序; 前言

中图分类号: TJ55; O64

文献标识码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2013.02.002

1 引言

一般而言, 经多年较系统的科学研究, 在国内外理论或专业期刊上发表了一定数量的学术论文, 人们便可选定围绕一个合适的题目, 对自身的研究工作加以整理和总结, 去伪存真, 去粗取精, 以自己的学术论文为素材, 精心组织加工, 出版学术专著。有些著作请名家作序, 有的通过前言或后记交代出书的背景和目的等。因为“序”和“前言”文字较少, 通常能集中地较自由地说出一些作者最想说的话, 所以阅读一部著作时, 对“序”或“前言”是应该特别留意的, 其中不乏精华之处。

本文对唐敖庆、张乾二两位理论化学家所撰写的“序”和“代序”^[1-2]以及作者们刚出版和即将出版的两部专著^[3,4]的前言, 通过引用、注释和阐述, 着重指出“量子炸药化学”这一提法的出处和含意及其向含能材料计算学的拓展和引伸; 对当前理论与计算化学研究和有关学术论文的评价问题, 也略抒己见; 以期引起关注和讨论, 目的是促进含能材料微观理论研究的健康发展, 借以庆祝《含能材料》建刊二十周年。

2 学习和评介唐敖庆为《硝基化合物的分子轨道理论》所作之序

在 20 世纪 90 年代(1992 年 2 月), 中科院院士唐敖庆先生为《硝基化合物的分子轨道理论》^[1]一书

收稿日期: 2013-01-30; 修回日期: 2013-02-04

作者简介: 肖鹤鸣(1940-), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事量子化学、分子动力学及其对含能材料结构、性能和设计的应用基础研究。

e-mail: Xiao@mail.njust.edu.cn

作序。他与从事量子化学教学和科研工作的肖鹤鸣教授, 曾经谈起过研究方向的事, 他根据华东工学院(南京理工大学前身)的实际情况, 建议肖鹤鸣结合炸药专业搞应用量子化学研究, 亦即从事“量子炸药化学”研究。

唐先生对南理工“用分子轨道理论方法, 系统地计算研究了碳硝基、氮硝基、氧硝基和叠氮类等各类主要高能材料(Energetic Materials)的电子结构、寻找结构与性能之间的规律联系”的研究工作给予了高度概括和高度评价。认为南理工“对高能材料的量子化学研究, 内容丰富, 很有特色, 有较高的学术水平, 在国内处于领先地位, 在国际上也有一定的影响。”并认为“该书的出版不仅对炸药科研工作有指导意义, 而且对高校师生学习运用分子轨道理论也有帮助。”他“希望在国内除进行“基础量子化学”研究外, 更多的同志应结合各自的专业从事“应用量子化学”研究。希望有更多富有特色的著作和教材问世, 百花齐放, 满园春色, 繁荣祖国的科技和教育事业, 为“四化”建设服务。”

唐敖庆教授是伟大的物理化学家和教育家。他是我国理论化学奠基人, 被誉为“中国量子化学之父”。他对我国科研和教育事业的杰出贡献, 与日月同辉, 与天地共存, 是永垂不朽的。当年他担任首届国家自然科学基金委员会主任委员等要职, 百忙之中竟为一本书作序, 足见他对高能物质微观理论研究多么关心和重视, 也表明他对该领域第一部学术专著的问世所给予的鼓励和支持, 还包含着恩师对学生们的期望和教导。

为尊重历史, 利于准确解读唐先生提出“量子炸药化学”研究方向的背景和内涵, 可以查阅《硝基化合物的分子轨道理论》引言中的前两段文字^[1]。

“自 1927 年 Heitler-London 用变分法处理氢分

子起,量子化学历经了60多年的建立和发展期,随着高速电子计算机和物质结构测试技术的迅速出现和更新,现已进入全面应用阶段。尤其是分子轨道(MO)理论方法更日益渗透于化学、物理、药物和生物等学科中,不少边缘学科(或新课程)如量子无机、量子有机、分子光谱学、微观反应动态学和量子药理学、量子生物学等如雨后春笋般出现。”这就是说,唐先生关于“量子炸药化学”的提法顺应了量子力学进入全面应用阶段之大势,预示着一个新的边缘学科的诞生。

“量子化学对火炸药学和起爆药学的应用形成量子炸药化学,这里的炸药是广义的,泛指爆炸物即包括火药、炸药和起爆药。运用MO理论方法计算炸药及其相关物的电子结构,探讨结构与性能之间的规律联系,构成量子炸药化学的基本内容。从事量子炸药化学研究的最终目标是从微观本质上阐明和预示火炸药及起爆药的各种性能,进而与其它相关学科一起,对它们的设计合成、生产、储存和安全使用起指导作用。”这段文字是20年前学习唐先生“序”所写,现在看来还是基本适用的。这里较清晰地定义了“量子炸药化学”及其研究内容和研究目的。

唐先生的“序”以前苏联希略波切列可夫教授1990年首访华东工学院及其后续发生的事为例,评价南理工量子炸药化学的早期工作“在国际上也有一定的影响”。原来“老希”对我们当年发表的论文^[5]很感兴趣,执意要来中国访问、寻找肖鹤鸣交流,他通过该国尤里院士与曾留学苏联的同学、梁栋才院士(首届国家自然科学基金委副主任)联系,再经唐先生找到肖;从而实现了两院士“搭桥”的早期中俄专家互访讲学和合作研究。“老希”先后曾派他的学生Pivina博士以及后续Foustov博士和Arnautova博士到南理工做访问学者,合作发表了论文^[6]。“老希”虽已早故,但他真诚推进中俄科技交流合作,功不可没,我们一直缅怀他。

唐先生很少作序,他有意借该“序”最后一段文字对全国的量子化学研究作出重要指示。他多次教导我们研究工作要富有特色。谨循此意,近二十年来,我们搞量子炸药化学研究,除关联一般物理、化学性质外,还特别注重关联硝化反应、热解起爆机理和感度、爆速、爆压、比冲等爆燃性质,从而获得了常规兵器、核、航天和二炮等国防单位的广泛关注和大力支持,借此顺表谢意。

3 有感《张乾二院士论文选集》的“代序”

张乾二院士把他在2008年6月在第十届全国量子化学学术研讨会上的一次讲话,代作他自己“论文

选集”的序,表明他对该讲话内容十分地重视。该讲话语重心长,教诲大家如何搞量子化学计算和理论研究,如何正确地去评价学术论文。

张先生的讲话指出当前从事理论化学研究存在两点不足之处。一是“有的同学没有很好思考,小分子就放进第一性原理的程序中,大体系就放到分子模拟程序中开始大算,这样做是很危险的。有的同学(包括一些老师)为了解释实验现象,甚至不顾科学性,牵强附会,实验工作想要什么结果就计算出什么结果,这种计算就像为实验外衣打补丁,不是真正的理论化学计算。好的计算应该是为实验量体裁衣,能从理论高度去预测实验,解释实验。”我们建议进行“量子炸药化学”研究,要力争吃透“量子”和“炸药”,即既要弄清量子化学的原理和方法;又要弄清所研究炸药体系及其特点,然后将二者紧密结合,努力做出真正能够推动含能材料学科发展、有益于国防和国民经济的工作来。

二是张先生在该“讲话”中批评了“当前的评估体系:要求一年要发表多少篇高影响因子的论文,要召开、参加多少会议,要得多少次奖励。一切待遇、科研经费都与此挂钩。”“以Nature、Science为旗帜,号召大家向这些杂志冲击。”他认为“Nature、Science杂志比较关注当前的热门课题,考虑大众的阅读兴趣,是综合性的杂志。要关心专业发展方向,还是要看专业杂志。评估一篇文章,不应看它的影响因子,而应看它对学科发展所起的作用。”“做理论研究,要想创新,必须不计名利,专注一个方向,潜心研究十年八年,相信会有收获的。”

张先生在“代序”中还谈了他的一点体会:“即科研中要注意建立自己的体系。选定了研究方向后,首先熟悉这个领域,找出该领域存在的创新点,并结合自己的强项,选择好课题。研究中要善于发现问题,持之以恒。科研中要有自己的思想,建立创新的方法,逐步建立自己的体系。”

我们听过张先生的讲话,阅读过“代序”,颇有同感。试想想,我们这个大国,有完整健全的教育科研管理体制,如果不去端正学科和专业的发展方向,不提倡潜心地系统地搞原创性研究,不深入地去考察论文的实际内容,进而细致地判定该论文的意义和作用;相反地,如果只盲目地去追求一堆数字,发多少篇论文,有多高影响因子等等;甚至仅仅根据影响因子大小,便一刀切地将期刊和论文分为一区、二区、三区和四区;一些单位则简单化地以奖金和待遇“指挥”大家向一区冲击。把我国长期具有较高声望和影响的期刊,如《中国科学》、《科学通报》、《化学学报》等综合和专业

期刊,一律打入四区。这不是在“指挥”大家别向中国期刊投稿吗? 这样下去,长此以往,违背实事求是、科学发展,只会助长形式主义和浮躁作风,将严重危害我国的科教及其出版事业。

《含能材料》创刊二十年,其成就和影响很大,这是有目共睹的,我们祝愿《含能材料》继续健康发展。我们认为不同类的学术论文,主要应投向最适合于它存在和发挥作用的各类专业期刊上去,而决不能仅仅以影响因子或一区、二区作导向。我们建议把优秀的量子炸药化学稿件,拿出一部分来投向《含能材料》,投向中国期刊,这正是使其适得其所!

4 《高能晶体量子化学》的前言

20世纪80年代,在“量子炸药化学”研究领域,主要都是运用半经验分子轨道(MO)方法,计算研究气相孤立分子的结构和性质。只对较少较小体系,才用从头算(ab initio)方法,在Hartree-Fock(HF)水平上进行计算,即不考虑瞬时电子相关。到20世纪90年代,由于密度泛函理论(DFT)方法的发展,它考虑了电子相关,计算机时又远少于超HF方法。故而,从南京大学陈兆旭教授在我校“攻博”开始,首次系统地把DFT用于高能化合物分子。这期间(1998~2000),他发表学术论文20多篇,出版《四唑化学的现代理论》^[7]专著,他的学位论文获评“全国优秀博士学位论文”(2001年)。

与高能分子的理论研究状况相类似,对于高能晶体结构和性质的计算和模拟,也经历了用近似的半经验方法到用精确的第一性原理方法的发展过程。早在20世纪80年代末,苏州大学樊建芬教授在我校攻读硕士学位,她首次用推广的Hückel晶体轨道(EHCO)方法,计算研究纤维素和硝化纤维素大分子的能带和电子结构,在Chin. J. Chem等期刊上发表,其内容已纳入《硝基化合物的分子轨道理论》专著中。稍后,李永富教授当年的博士学位论文,在《中国科学》^[8]等期刊上发表,并出版《金属叠氮化物的能带和电子结构——感度和导电性》(1996)专著,用的是半经验的离散变分 $X\alpha$ (DV- $X\alpha$)方法以及EHCO方法。这些工作应该是系统研究高能晶体的最早理论工作。

进入21世纪,中国工程物理研究院姬广富研究员在我校“攻博”时,主要工作之一就是开拓性地运用Crystal 98程序,首次对HMX和TATB等典型高能分子型晶体实施DFT研究;稍后,居学海教授在我校从事博士后研究期间,也运用该程序做了较多工作,包括

对一些金属叠氮化物、Fox-7、ONC、PETN和NTO等晶体能带和电子结构以及各种性质进行研究。他们的工作发表在《化学学报》和J. Chem. Phys.等国内外学术期刊上,多数已汇入《高能化合物的结构和性质》^[9](2004)学术专著中。

自2005年我校分子与材料计算研究所建立至今,我们承接了更多国家自然科学基金和国家安全重大基础研究(973)等项目。运用DFT方法和平面波基组,在选择多种泛函对晶体和分子几何进行全优化等更高计算水平上,对各类型多系列高能晶体进行了系统的周期性DFT研究;提供和比较了结构类似物或多种晶型的晶胞和分子几何参数以及能带和电子结构的共性和差别;给出详尽的吸收光谱、振动光谱并在电子微观层次上予以深入细致的比较和分析;提供它们的热力学函数及其在分解反应中的变化。研究了掺杂晶体的结构和性质。总结了一些晶体在不同压力下结构和性能的递变规律。阐明晶体能带和电子结构与感度的关系,提出撞击感度的第一性原理带隙判据。还用从头算分子动力学(ab initio MD)方法,分别地模拟研究了离子型和分子型晶体在不同温度下的结构和性能,直观地揭示了分解和起爆机理。以上研究工作在J. Phys. Chem. A B C、J. Chem. Phys.、J. Comput. Chem.和Phys. Chem. Chem. Phys.等学术期刊上发表;该20余篇论文加上一些尚待在期刊上发表的工作,构成本书的基本内容。

应该指出,在我们指导下,许晓娟博士和邱玲博士曾对笼状和氮杂环硝胺高密度化合物(HEDC)如CL-20、双环-HMX和TNAD等,在不同压力下的晶体能带和电子结构及其与热解、感度等性能的关系,进行过深入细致的DFT和MD模拟研究,均已在J. Phys. Chem. B上发表。但因这些工作已编进《高密度材料的理论设计》^[10](2008)专著中,她二人的学位论文也已先后获“全国优秀博士学位论文提名奖”(2009、2010),故本书未包括她们的相关研究工作。

众所周知,高能化合物多处于凝聚态特别是晶态,在炸药和推进剂中它们亦多以固态出现。所以研究高能晶体的结构和性能,不但具有重要理论学术意义,而且具有重要的实用价值。以上对我校相关理论研究历程的简要回顾,表明我国关于高能晶体结构和性能的计算/模拟研究,起步很早,研究方法先进多样,研究内容系统全面,能够将电子结构深入地关联物理、化学和爆炸等诸多性质,实用性较广。

总之,《高能晶体量子化学》一书的前言,较详尽

地回顾了我国高能晶体量子化学的研究历程,介绍了本书出版背景和主要内容,兼具文献综述和新书简介效果。主要是把我国量子炸药化学从用半经验方法发展到用第一原理 DFT 方法、从研究高能分子拓展到研究高能晶体的进程作出了较清晰的说明。

5 《高能材料分子动力学》的前言

自然科学的发展经常也遵循“分久必合,合久必分”的规律。理论化学以量子化学为主,涵盖统计力学和微观反应动力学等。计算化学以分子动力学为主,由分子力学发展而来,也依赖统计力学,包括蒙特卡罗(Monte Carlo)方法等。原本理论化学和计算化学是分开的,均归属于物理化学学科;随着二者理论和方法的交叉发展,以及迅猛发展的计算机及其网络系统的大力推进,现“理论与计算化学”又有“合”的动向,且也有概称为“计算机化学”而单列学科的趋势。

从 20 世纪 70~80 年代开始,得助于我国理论化学奠基人、我校名誉教授唐敖庆老师和我国著名含(高)能材料(Energetic Materials)专家、老系主任肖学忠教授等的倡导和支持,我校开创并一直从事“量子炸药化学”研究,亦即从事物理化学和含(高)能材料两个学科的结合研究:主要是把量子化学、统计热力学、化学动力学和分子力学、分子动力学等理论方法,系统地应用于火炸药、起爆药等各类爆炸物的分子、超分子、晶体和复合材料,计算和模拟了它们的结构和性能,为的是阐明缘由、总结规律、预示未知、设计和指导合成与配方研究,进而达到服务于我国国防、航天和相关国民经济的目的。

在跨世纪的 30 年内,我校在对“量子炸药化学”这一新方向、新领域和新的交叉学科的创立、开辟和研究中,首先和最多地运用的当然是各种量子化学理论方法,从 HMO、EHMO、CNDO、INDO、MINDO、MNDO、AM1、PM3 和 $X\alpha$ 等半经验分子轨道方法,到多种水平的第一性原理从头计算(ab initio)和密度泛函理论(DFT)方法,相关学术论著已发表较多,这里无需赘述。其次,几乎与应用量子化学研究并行,通过培养研究生和完成科研项目,我们也较多地运用了多种分子力学和分子动力学的理论方法。对此,由于紧扣本书主旨,这里不妨多说几句。

早在 20 世纪 80 年代末,中国石油大学王大喜教授在我校攻读博士学位,他的博士学位论文的主要内容就是优化硝酸酯的力场参数并用于硝酸甲酯水解反应和溶剂效应的 QM 和 MM 研究(化学学报,1992,

50,335;J. Phys. Org. Chem., 1992, 5, 361; 硝基化合物的分子轨道理论,科学出版社,1993, 356~380)。这是运用 Allinger MM2 力场研究爆炸物动态性质的最早工作,获特邀于 1992 年全国物理有机化学会议作大会报告。在上世纪末,我校与荷兰 Delft 理工大学联合培养博士生,贡雪东教授和苏州大学樊建芬教授当年的博士学位论文,其中部分工作就是完成了有关共轭体系和沸石的 Delphi 力场参数优化,并用于有机气体在沸石中吸附、扩散和催化的 MM 和 MD 研究(化学学报,1997,55,440;Chin. Sci. Bull.: 1994, 44, 598; J. Mol. Struct. 1999, 492, 133; Chin. J. Chem. 2001, 19, 251)。其中樊建芬从事的 MD 模拟研究,当时在国内还刚刚起步,获得了当年国家自然科学基金(29773021)的资助。

进入本世纪以来,肖继军、马秀芳、许晓娟、邱玲、朱伟、于艳春等先后在我校获得博士学位。他们的学位论文中或多或少都包含火炸药结构-性能 MD 模拟的内容。在这里,我们较多运用了 Materials Studio 材料科学软件和孙淮教授开发的 COMPASS 力场,也根据需要运用过自行扩展的 MPCFF 力场和普适的 UFF 和 Dreiding 力场等。通过经典 MD 模拟,我们完成了(有些还正在完成着)国家自然科学基金项目(10176012,20173028)、国防科工委基础科研项目(K17001061001)、冲击波物理与爆轰物理国防科技重点实验室及其主任基金项目、中国工程物理研究院化工材料研究所和流体物理研究所的合作研究项目、国家安全重大基础研究项目(973-61337、61340 和 613142)以及爆炸科学与技术国家重点实验室(北京理工大学)开放基金等较多项目。肖继军教授在指导多位硕士生(黄玉成、王艳群、张航、夏露、汪文睿、李松远、赵丽、刘冬梅和刘强等),并在协助指导上述博士生完成这些任务的同时,率先开辟了高能混合体系如高聚物粘结炸药(PBXs)和推进剂、发射药的经典 MD 模拟,特别是对它们的力学性能进行了系统的研究。朱伟副教授自 2008 年毕业离我校至今,仍在嘉兴学院继续参加和完成了我校承担的如上较多科研工作中,成绩显著。2005 年以来,朱卫华教授在完成国家自然科学基金(10576016)、国家安全重大基础研究项目(973-61337, 61339)和中国工程物理研究院化工材料研究所合作项目中,对各类型高能晶体的能带和电子结构进行了系统的理论研究;这其中,他开辟了极端条件(高温、高压和冲击波加载)下多类典型炸药

晶体的从头算分子动力学模拟(CP-MD)的新方向,并首次报导了它们的分解起爆引发机理。

综上所述,我校从事理论与计算化学研究,起步较早,持续不断。30年来,在“量子炸药化学”或“高能材料计算学”研究领域,我们目睹和经历了量子化学和经典分子动力学的“分”,又实现了二者在量子分子动力学中的“合”,充分地有趣。本书是经典分子动力学和量子分子动力学在该研究领域的应用,概括了我们近十年来的相关科研和教学成果。本书包含了十多位研究生的学位论文,并以他们在国内外学术期刊上发表的数十篇论文为素材,称得上是“著”而不是“编”了。但因所研究的课题很复杂,涉及面非常广,而作者们的阅历和知识面尚较欠缺,水平有限,加之时间和精力也不够,故本书肯定有许多不足之处。抛砖引玉,仅供读者参考,恳请读者批评指正。

这里首次给出2013年即将出版的《高能材料分子动力学》一书的前言,起到文献综述和新书预报的作用。在该前言中较详尽地回顾了分子力学、特别是分子动力学的发展应用状况,体现对前人工作的承接和对研究历史的尊重。较详细列出本书获得的诸多项目资助,并列出众多硕、博研究生的参与和贡献,一方面是交代了出书的背景,同时还隐含着对方方面的深切感激之情。通过阅读该前言,不仅应能理解为什么《量子炸药化学》应该和必须拓展和引申为《含能材料计算学》,而且还能体会到,这种引申和拓展是有机地交叉地进行的,并且符合“分久必合,合久必分”的发展大势。当然,含能材料计算学(或计算含能材料学)的内涵更宽更丰富,不仅应包括如本文所介绍的微观(如量子化学、分子动力学等)理论方法,而且应包括介观、宏观尺度的理论与计算方法,亦即凡是运用计算机计算和模拟含能材料结构与性能的研究,均可归属于它。本文涉及面颇广,不当之处,恳请批评指正。

参考文献:

- [1] 肖鹤鸣. 硝基化合物的分子轨道理论[M]. 北京: 国防工业出版社, 1993.
XIAO He-ming. Molecular Orbital Theory for Nitro Compounds [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1993.
- [2] 张乾二. 张乾二院士学术论文选集[M]. 北京: 科学出版社, 2008.
ZHANG Qian-er. Academician Zhang Qianer's Academic Anthology [M]. Beijing: Science Press, 2008.
- [3] 朱卫华, 肖鹤鸣. 高能晶体量子化学[M]. 北京: 科学出版社, 2012.
ZHU Wei-hua, XIAO He-ming. Quantum Chemistry of Energetic Crystals [M]. Beijing: Science Press, 2012.
- [4] 肖继军, 朱卫华, 朱伟, 肖鹤鸣. 高能材料分子动力学[M]. 北京: 科学出版社, 2013.
XIAO Ji-jun, ZHU Wei-hua, ZHU Wei, et al. Molecular Dynamics of Energetic Materials [M]. Beijing: Science Press, 2013.
- [5] 肖鹤鸣, 王遵尧, 姚剑敏. 芳香族硝基炸药感度和安定性的量子化学研究——I. 苯胺类硝基衍生物[J]. 化学学报, 1985, 43(1): 14-18.
XIAO He-ming, WANG Zun-yao, YAO Jian-min. Quantum chemical study on sensitivity and stability of aromatic nitro explosives. I. nitro derivatives of aminobenzenes [J]. *Acta Chimica Sinica*, 1985, 43(1): 14-18.
- [6] Elena A A, GONG X D, XIAO H M, et al. Prediction of crystal structure and density for benzotrifuroxan (BTF) by AAPM [J]. *Journal of Molecular Science*, 1998, 14(3): 138-148.
- [7] 肖鹤鸣, 陈兆旭. 四唑化学的现代理论[M]. 北京: 科学出版社, 2000.
XIAO He-ming, CHEN Zhao-xu. The Modern Theory for Tetrazole Chemistry [M]. Beijing: Science Press, 2000.
- [8] 肖鹤鸣, 李永富. 金属叠氮化物的能带和电子结构-感度和导电性[J]. 中国科学(B辑) 1995, 25(1): 23-28.
XIAO He-ming, LI Yong-fu. Banding and electronic structures of metal azides-sensitivity and conductivity [J]. *Sci China Ser B*, 1995, 25(1): 23-28.
- [9] 肖鹤鸣. 高能化合物的结构和性质[M]. 北京: 国防工业出版社, 2004.
XIAO He-ming. Structures and Properties of Energetic Compounds [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2004.
- [10] 肖鹤鸣, 许晓娟, 邱玲. 高能量密度材料的理论设计[M]. 北京: 科学出版社, 2008.
XIAO He-ming, XU-Xiaojuan, QIU Ling. Theoretical Design of High Energy Density Materials [M]. Beijing: Science Press, 2008.

“Quantum Explosive Chemistry” and its Continuation——Comment on “Prefaces” and “Forewords” of Several Academic Works

XIAO He-ming, ZHU Wei-hua, XIAO Ji-Jun, WANG Gui-xiang, LIU Dong-mei

(Institute for Computation in Molecular and Materials Science, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China)

Abstract: In this article, the prefaces and forewords of several early and newly published and forthcoming academic works were presented. Around the meaning of the statement of “Quantum Explosive Chemistry” and its continuation, the problems of how to undertake relevant theoretical studies and how to assess academic papers etc. were remarked and elucidated briefly in order to promote the healthy development of computational energetic materials science.

Key words: quantum explosive chemistry; computational energetic materials science; preface; foreword

CLC number: TJ55; O64

Document code: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2013.02.002