

文章编号:1673-9981(2009)03-0162-06

# 第一性原理计算 $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ 电子结构及力学性能

汝 强<sup>1</sup>, 邱秀丽<sup>2</sup>

(1. 华南师范大学物理与电信工程学院, 广东 广州 510006; 2. 华南农业大学工程学院, 广东 广州 510642)

**摘 要:**利用密度泛函理论的第一性原理方法,采用 CASTEP 程序包对  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  的能带结构、电子态密度及弹性常数进行了计算,计算结果表明: $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  能隙约为 6.8 eV;  $\text{Al}^{3+}$  和  $\text{O}^{2-}$  之间存在明显的电子转移现象,电子分布具有明显的定域性,但由于极化或杂化现象,Al-O 键主要为离子键和少量共价键。 $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  表现出过渡型化合物的特点; $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  的体积弹性模量为 254.253 GPa, 剪切模量为 157.911 GPa。

**关键词:** $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; 电子结构; 第一性原理

**中图分类号:** O141.4 **文献标识码:** A

$\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  具有晶型稳定、硬度高及耐酸碱等特性,在机械、化工等领域中得到广泛地应用,常用于制造高强度耐磨、绝缘和高级耐火材料及金属基增强材料等。此外, $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  电导率低,具有良好的绝缘性能及介电性能,也可应用于 YGA 激光晶体及集成电路基板中。

目前,人们围绕  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  合成制备开展了一系列的研究工作,但由于材料合成工艺的多样性,势必导致不必要的重复与浪费,所以从电子层次上认清  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  的微结构,对其化学性能进行正确的预测,进而找出提高材料性能的措施就显得尤为重要。密度泛函理论<sup>[1]</sup> (Density Functional Theory, DFT) 的第一性原理是量化计算材料电子结构及其性能的有力工具,其重要性在材料设计、合成、微结构模拟及催化吸附等方面日益凸显<sup>[2]</sup>。由于以往的研究均集中在材料微结构方面,从电子层次上对材料力学性能的研究报道较少。因此,本文从电子层次上对  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  进行了研究,利用第一性原理计算了  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  的电子结构,并分析了其力学性能。

$\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  晶体属于三角晶系,紧密堆积构型,空间群为 R-3C, 晶格常数  $a = b = 0.4759 \text{ nm}$ ,  $c = 1.291 \text{ nm}$ , 其中氧原子按六方紧密堆积排列,6 个氧原子围成一个八面体,Al 原子占据于 2/3 的八面体间隙位置,分布在氧原子围成的八面体配位中,图 1 为  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  晶体结构图。

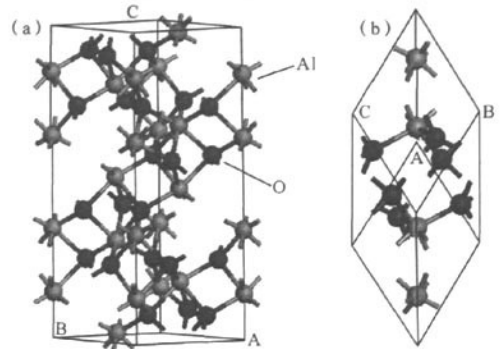


图 1  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  晶体结构

(a) 六方晶胞结构; (b) 菱形单位晶胞结构

Fig. 1 Crystal structure of  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$

(a) monoclinic unit cell; (b) rhombohedral unit cell

## 1 物理模型与计算方法

收稿日期:2008-12-02

作者简介:汝强(1977-),男,山东济南人,博士。

文中计算基于密度泛函理论的第一性原理方法,具体采用美国 Accelrys 公司 Materials Studio 4.1 计算软件包 CASTEP (Cambridge serial total energy package) 程序完成<sup>[3]</sup>. 根据密度泛函理论,单电子波函数的 Schrödinger 方程表示为:

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + V_{\text{eff}}(\vec{r}, \rho(\vec{r}))\right] \varphi_n(\vec{r}) = \epsilon_n \varphi_n(\vec{r}), \quad (1)$$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_n a_n |\varphi_n(\vec{r})|^2. \quad (2)$$

式(1)中  $\frac{\nabla^2}{2m}$  表示体系中有有效电子动能,  $V_{\text{ext}}(\vec{r})$  表示外场的势,  $V_{\text{eff}}(\vec{r}, \rho(\vec{r}))$  为有效势,  $\rho(\vec{r})$  为体系的电子态密度泛函,  $V_{\text{xc}}(\vec{r})$  为电子间交换相关势,其可由局域密度近似(LDA, local density approximation)和广义梯度近似(GGA, general gradient approximation)来表示. 式(2)中  $a_n$  为第  $n$  个本征态的电子态占据数,  $\varphi_n(\vec{r})$  表示单电子波函数.

具体计算时交换相关势选取广义梯度近似中的 PW91 函数形式,体系中原子核与内层电子对外层电子之间的库仑吸引势采用超软赝势(ultrasoft pseudo-potential)表示,波函数由平面波展开,平面波切断动能  $E_{\text{cut}} = 400$  eV,自洽迭代过程总能量收敛设为  $5.0 \times 10^{-7}$  eV/原子,  $k$  点网格选取布里渊区  $6 \times 6 \times 6$  个点. 对计算结果进行能带结构、态密度(DOS)、分波态密度(PDOS)、电子密度分布及力学常数等分析,其中  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  中 O 原子外层电子组态为  $2s^2 2p^4$ , Al 原子外层电子组态为  $3s^2 3p^1$ .

## 2 电子结构与力学性能

### 2.1 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的能带结构与态密度分析

$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的能带如图 2 所示. 从图 2 可见:  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的能带结构较为平坦,表现出离子化合物的特征;费米能级穿过价带的顶部,表现出典型的绝缘体特征,电子难以在热激发或外电场作用下获得足够的能量由满带跃入空带. 由于 GGA 计算误差,禁带能隙理论计算值  $E_g = 6.8$  eV, 小于实验值 8.7 eV, 但计算结果的相对值非常准确,并不影响对电子结构的理论分析.

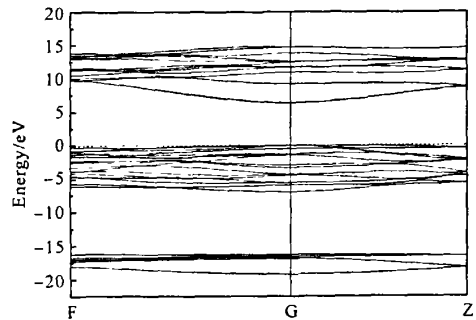


图 2  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  晶体的能带结构

Fig. 2 Energy band structure of  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  crystal

图 3 为  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的总态密度及分态密度分析. 通过对分态密度(PDOS)的进一步计算,可以了解 Al 和 O 对总态密度不同的贡献,在整体态密度基础上绘制了晶胞中 Al 原子和 O 原子的有效轨道的分态密度. 由图 3(a)可知,  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的态密度由 3 个区域组成:价带底部即  $-20 \sim -15$  eV 较低能量的 A 区域,其态密度主要是来自于 Al 原子和 O 原子 2s 轨道及少部分来自于 Al 原子的 3p 轨道;价带的上

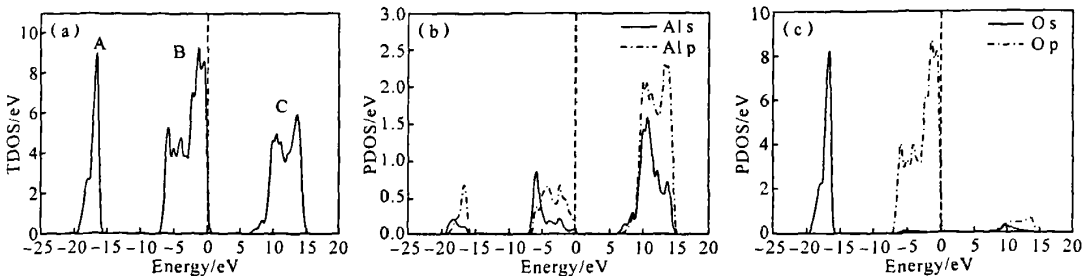


图 3  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的总态密度及分波态密度分析

(a)  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的总态密度; (b) Al 原子分态密度; (c) O 原子分态密度

Fig. 3 Total electron densities and Partial electron states densities of  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$

部即 $-7.5\sim 0$  eV的B区域为成键轨道,其态密度主要是来自于Al原子的3p轨道和O原子的2p轨道;导带即 $5\sim 15$  eV的C区域,主要是Al原子和O原子组成的反键轨道.实验的态密度分析结果与文献[4]和文献[5]的研究结果较为一致,这是由于O原子的2p轨道与Al原子的3s和3p轨道能量相近,存在一定的杂化现象,可形成部分共价键.通过分析图3的峰形可知,杂化现象较弱,共价键所占比例较小,这也表明 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 是一个离子键较强而共价键较弱的混合键材料.

## 2.2 Mulliken 布居分析

$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 晶体中各原子轨道上电荷的分布列于表1.由表1可知, $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 属典型的离子晶体,Al原子带正电荷为+1.62,氧原子带负电荷为-1.08.这是由于费米能级附近的Al原子和O<sub>2p</sub>轨道上的电子形成 $2p\sigma$ 和 $2p\pi$ 成键轨道,电子之间有较强的相互关联作用,Al原子将丢失的外层电子转移到O原子的周围,因此Al原子的大部分电子被O原子定域,Al和O之间形成较强的Al-O离子键,这与图3(b)和图3(c)的态密度分析结果相同.

表1  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 晶体中各原子轨道上电荷分布  
Table 1 Atomic populations in  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  cell

原子	s轨道	p轨道	总数	电荷 e
O	1.84	5.24	7.08	-1.08
Al	0.50	0.88	1.38	1.62

通过布居数分析,可确定不同原子间化学键结合情况,以及不同原子轨道在化学键中的作用, $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 晶体的键长及键布居数列表2.由表2可知: $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 晶体中含有两种不同的Al-O键,键长分别为0.1856 nm和0.1969 nm,这是由于在刚玉型结构中 $\text{AlO}_6$ 八面体存在一定的畸变,这种变形结构会降低晶体的对称性,导致原子键长及原子的电荷量发生变化;O-O键之间的布居数为负值,这表明O-O键存在较大排斥力,O离子有向八面体外移动的趋势.由于半径较小为0.053 nm的 $\text{Al}^{3+}$ 位于八面体的中心,对相邻的O离子会发生诱导作用,使Al-O键结合紧密,O离子在静电力的作用下有被Al离子拉向八面体内部的趋势,当极化能力强的 $\text{Al}^{3+}$ 和变形性大的 $\text{O}^{2-}$ 接近时, $\text{O}^{2-}$ 的电子云逐渐变形,使两核间的电子云密度增大,电子云的变形

导致轨道的相互重叠,发生极化现象,生成极性较小的键,于是离子键的比例减少,而共价键的比例增大,因此在 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 晶体中存在部分的共价键.

表2  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 晶体的键长及键布居数  
Table 2 Charge populations in  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  cell

原子键	键布居数	键长/nm
O-Al	0.35	0.1856
O-Al	0.26	0.1969
O-O	-0.17	0.2522
O-O	-0.16	0.2619
Al-Al	-0.49	0.2650
O-O	-0.10	0.2725
Al-Al	-0.62	0.2790

## 2.3 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的电子密度分布

对通过计算得到的 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 电子密度进行特定切割,得到(110)晶面的电子密度,并采用平均值形式对电子密度进行数值标定,图4为 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的电子密度分析图.由图4(a)可见,电子在O离子周围积聚,而 $\text{Al}^{3+}$ 周围的电子密度较低,电子密度分布具有明显的定域性,表现出较强的离子键特性,但O离子周围的电子云呈不完全球形.图4(b)等电荷密度面分析也表明,O离子周围的电子云呈现不规则的球状.对于 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 晶体来说,Al-O键存在少部分共价键成分,这与 $\text{AlO}_6$ 八面体中半径较大的O离子与心部极化力较强的Al离子发生极化或部分杂化成键有关.由此可知,Al-O键之间主要通过离子键及少量共价键相连接, $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表现出过渡型化合物的特点.

## 2.4 力学性能

弹性常数描述了晶体对外加应变的响应刚度,体弹性模量 $B$ 与晶体中原子的键能密切相关,可用来评判平均价键强度;剪切模量 $G$ 用来衡量材料对剪切变形能力的大小.忽略温度对体系总能的影响,体系的总能 $E$ 是体积 $V$ 和应变 $\epsilon$ 的函数.当晶格发生的应变较小时,可以通过对体系总能函数的泰勒式展开得到弹性常数,其中忽略高次项.

$$E(V, \epsilon) = E(V_0, 0) + V_0 \sum_i \sigma_i \epsilon_i + \frac{V_0}{2} \sum_{ij} C_{ij} \epsilon_i \epsilon_j + \dots \quad (3)$$

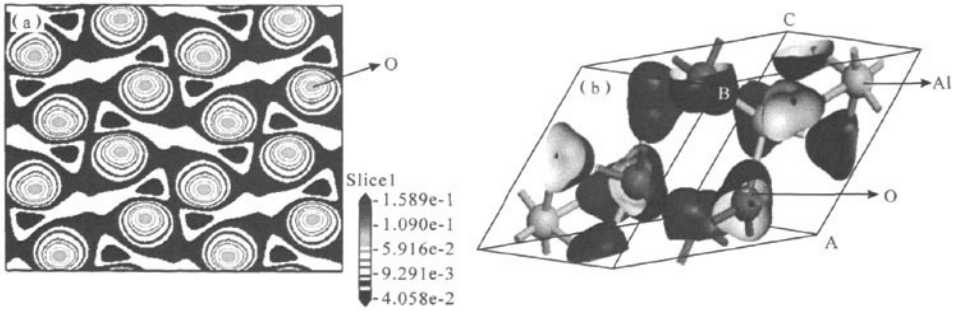


图4 电子密度分析 (a) (110)面; (b)等密度面  
Fig.4 Electron density of (110) plane and iso-surface

式(3)中: $V_0$  是晶格未变形时的体积,  $E(V_0, 0)$  是应变前体系总能. 由于对称性的差异, 不同类型的晶体结构存在特定的弹性常数. 多晶材料的弹性模量通常可利用 Voight 近似、Reuss 近似及 Hill 近似三种模型得到<sup>[6]</sup>, 前两种模型可得到弹性模量的最大值和最小值, 而 Hill 模型得到前两种模型的修正值. 多晶的体弹性模量  $B$  和剪切模量  $G$  可由下面的等式得到.

对于 Voight 近似模型:

$$B_v = \frac{1}{9}(C_{11} + C_{22} + C_{33}) + \frac{2}{9}(C_{11} + C_{13} + C_{23}), \quad (4)$$

$$G_v = \frac{1}{15}(C_{11} + C_{22} + C_{33}) + \frac{1}{15}(C_{12} + C_{13} + C_{23}) + \frac{1}{5}(C_{44} + C_{55} + C_{66}). \quad (5)$$

对于 Reuss 近似模型:

$$B_R = ((S_{11} + S_{22} + S_{33}) + 2(S_{12} + S_{13} + S_{23}))^{-1}, \quad (6)$$

$$G_R = 15/[4(S_{11} + S_{22} + S_{33}) - 4(S_{12} + S_{13} + S_{23}) + 3(S_{44} + S_{55} + S_{66})]. \quad (7)$$

式(4)及式(6)中  $C_{ij}$  和  $S_{ij}$  分别为弹性常数和弹性系数. 对于 Hill 近似模型, 通过求弹性常数的逆矩阵得到  $G_H = \frac{1}{2}(G_v + G_R)$ ,  $B_H = \frac{1}{2}(B_v + B_R)$ . 根据弹性力学可知, 材料的杨氏模量  $E$  和泊松比  $\gamma$  分别为:  $E = \frac{9BG}{3B+G}$ ,  $\gamma = \frac{1}{2}(1 - \frac{E}{3B})$ .  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的力学参数分别列于表3和表4. 由表3和表4可知, 理论计算值与已有的理论参考值及实验值相差较小.

表3 弹性常数、杨氏弹性模量及泊松比

Table 3 Elastic Stiffness Constants  $C_{ij}$ , Yong's modulus and Poisson's ratio

力学参数	理论计算值/GPa	理论参考值 <sup>[6-7]</sup> /GPa	实验参考值 <sup>[8-9]</sup> /GPa	
弹性常数	C11	485.755	476.8, 451.5	497
	C12	165.988	157.6, 148.4	163
	C13	125.422	119.4, 107.6	116
	C33	484.657	476.6, 492.5	501
	C44	143.491	145.5, 154.2	147
杨氏弹性模量 E	392.480	391.6	335	
泊松比 $\gamma$	0.243	0.2356	0.25	

由电子结构分析已知,  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的键结构表现为多重性, 在六方紧密堆积构型的结构中,  $\text{Al}^{3+}$  与  $\text{O}^{2-}$  之间的静电吸引力大, 表现出很强的离子键特性, 又由于极化或杂化效应也表现出部分共价键属

性, 这种空间结构的复合键可以阻碍位错运动, 在外力作用下材料有较强的抵抗变形的能力, 且  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  有较大的带隙(6.8 eV), 断裂时需要的能量较高, 这在宏观上表现出大的体积弹性模量 254.253 GPa.

根据 Pugh 经验判据,可以用体积模量  $B$  与剪切模量  $G$  的比值来衡量材料的脆性,如果  $B/G > 1.75$ ,则材料呈现延性,否则表现为脆性.对于  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  来说,三种近似模型计算得到的  $B/G$  值分别为 1.604, 1.617 和 1.610,  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  表现出脆性材料的特性.在刚玉型  $\text{Al}_2\text{O}_3$  晶体中滑移系较少,只有一个滑移

面(001)和两个滑移方向,滑动过程中受离子键的作用,正负离子强烈吸引,邻近同号离子剧烈排斥,这使得滑移过程难以进行,塑性变形受到严格限制,同时在外力作用下,原子键一旦断裂,将很难再与其他键结合,表现出脆性断裂的特征, $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的剪切模量相对较小为 157.911 GPa.

表 4 体积模量  $B$  和剪切模量  $G$  的三种近似计算结果  
Table 4 Approximate calculation results of Bulk modulus Shear modulus

	本文理论计算结果			理论参考值 <sup>[6-7]</sup>	实验参考值 <sup>[10]</sup>
	Voigt 模型	Reuss 模型	Hill 模型		
体弹性模量/GPa	254.426	254.081	254.253	246.9,259.3	248
剪切模量/GPa	158.662	157.160	157.911	158.5,165.8	164.7
$B/G$	1.604	1.617	1.610	—	—

### 3 结 论

(1) 理论计算  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的禁带宽度为 6.8 eV; 结果表明,在 Al 和 O 原子之间存在强烈的电子的转移现象; $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  是典型的离子晶体, $\text{O}^{2-}$  周围具有较高的电子密度,而  $\text{Al}^{3+}$  周围的电子密度较低,电子密度分布具有明显的定域性,表现出较强的离子键特性,但氧原子周围的电子云呈不完全球形,表明 Al-O 键存在部分极化或杂化成键现象.

(2) 在六方紧密堆积构型的结构中,Al-O 键主要为强离子键及少量共价键,这种复合键结构使材料有较强的抵抗变形的能力, $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  理论体积弹性模量为 254.253 GPa,剪切模量为 157.911 GPa,材料表现出明显的脆性特性.

#### 参考文献:

- [1] JANAK J F, MORRUZI L. Ground-state thermomechanical properties of some cubic elements in the local-density formalism [J]. Phys Rev B, 1975, 12: 1257-1261.
- [2] 张向超, 杨华明, 陶秋芬.  $\text{TiO}_2$  基纳米材料第一性原理计算模拟的研究进展[J]. 材料工程, 2008(1): 76-79.
- [3] SEGALL M D, PHILIP J D, PROBERT M J, et al. First-principles simulation; ideas, illustrations and the

CASTEP code [J]. Journal of Physics, 2002, 14: 2717-2744.

- [4] 杨春, 余毅, 李言荣, 等.  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  (0001) 表面弛豫及其对表面电子态的影响[J]. 化学物理学报, 2004, 17(5): 537-542.
- [5] 冯晶, 肖冰, 陈敬超, 等. 第一原理计算  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  电子态密度性质分析[J]. 昆明理工大学学报: 理工版, 2006, 31(4): 18-22.
- [6] YAO H Z, OUYANG LZ, CHING WY. Ab initio calculation of elastic constants of ceramic crystals[J]. Journal of The America Ceramic Society, 2007, 90(10): 3194-3204.
- [7] SHANG Shunli, WANG Yi, LIU Zikui. First-principles elastic constants of  $\alpha$ - and  $\beta\text{-Al}_2\text{O}_3$  [J]. Appl Phys Lett, 2007, 89: 131909. 1-131909. 3.
- [8] GLADDEN J R, JIN H S, MAYNARD J D, et al. Reconciliation of ab initio theory and experimental elastic properties of  $\text{Al}_2\text{O}_3$  [J]. Appl Phys Lett, 2004, 86(3): 392-394.
- [9] HOVIS D B, REDDY A, HEUER A H. X-ray elastic constants for  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  [J]. Appl Phys Lett, 2006, 88: 101910. 1-101910. 3.
- [10] HOLM B, AHUJA R, YOURDSHAHYAN Y, et al. Elastic and optical properties of  $\alpha$ - and  $\kappa\text{-Al}_2\text{O}_3$  [J]. Physical Review B, 1999, 50(20): 12777-12787.

## The electronic structure and mechanical property of $\alpha$ Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> by first principles calculation

RU Qiang<sup>1</sup>, QIU Xiu-li<sup>2</sup>

(1. School of Physics and Telecommunication Engineering, South China Normal University, Guangzhou 510006;

2. College of Engineering, South China Agricultural University, Guangzhou 510642)

**Abstract:** Based on density functional theory (DFT) of the first principles, the electronic structures, total density of states (DOS), and elastic constants of  $\alpha$  Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> are calculated by the plane wave ultrasoft pseudo-potential method using Cambridge serial total energy package (CASTEP) program. It is found that the band gap of  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> is about 6.8 eV. The results of DOS and Mulliken charge population indicate that there are obvious electron transition between Al and O atomic, electron is visibly localized.  $\alpha$  Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> is characterized with the transition oxide, including a majority of ionic bond and a partial covalent bond due to the polarization or hybrid orbital. In closed-packed hexagonal system, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> is characterized with the high bulk modulus about 254.253 GPa, the shear modulus is relatively low only about 157.911 GPa.

**Key words:**  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; electronic structure; first principles

### 2010年《炭素技术》杂志征订启事

《炭素技术》杂志创刊于1982年,是经国家科委和新闻出版署批准的国内外公开发行的炭素专业科技期刊。国内统一刊号CN 22-1147-TQ,国际标准刊号ISSN 1001-3741,广告经营许可证号吉工商广字:220204400009。办刊宗旨是交流技术、传播信息,促进炭素工业及炭材料学科技术进步。主要介绍我国炭素工业及相关行业的生产技术、科学试验、理论研究、经营管理、市场信息,使用设备的开发与更新,产品质量监督、环境保护与综合利用、检测、计算机在炭素生产领域应用等方面的经验成果;报导炭材料学科包括钢铁冶金用炭材料、铝用炭材料、电炭材料、碳纤维及复合材料、活性炭、金刚石及石墨层间化合物、各种新型炭材料、特种炭材料等的新产品、新工艺以及炭材料应用技术研究、有关炭材料领域和炭素工业国外先进技术和发展动态。

《炭素技术》设有专家讲座、实验研究、经验交流、综述述评、计算机应用与控制、技术改造、节能环保、行业信息、消息报导、炭素文摘、专利等栏目。

《炭素技术》杂志目前已成为中国科技核心期刊,已加入《中国期刊网》、《中国学术期刊》(光盘版)全文数据库、万方数据系统数字化期刊群、中文科技期刊数据库、同时还被《美国化学文摘》、《俄罗斯化学文摘》等国外情报机构检索;是《CAJ-CD规范》执行优秀期刊。

《炭素技术》的发行面覆盖了全国的炭素厂家、有关的科研院所、大专院校及生产炭素用原料、机械设备等生产单位。

本刊为大16开版本,双月刊,单价15.00元,全年订价90.00元。国内邮发代号:12-308,全国各地邮局均可订阅,也可与编辑部联系补订。

本刊承接彩色、黑白广告业务,热忱地为国内外企业服务,宣传产品,推广技术,树立企业形象。

地址:吉林市哈达湾和平街9号《炭素技术》编辑部

邮编:132002

开户行:工商银行吉林市分行哈达湾办事处

户名:中钢集团吉林炭素股份有限公司

帐号:0802210609000000171

电话:0432-2749715(传真) 2749271

E-mail:tsjsbjb@126.com