

* 中文核心期刊
* 中国科技核心期刊
* RCCSE 中国核心学术期刊
* 中国科学引文数据库来源期刊
* EI、SCOPUS、CA、CSA、AJ、JST 收录期刊

目次

第 26 卷 第 1 期 2018 年 1 月 25 日

计算含能材料学专辑

◆ 含能快递	(1)
◆ 特约评论	
含能材料能量-安全性间矛盾及低感高能材料发展策略	张朝阳 (2)
◆ 综述	
含能材料中“热点”的理论模拟研究进展	钟 凯, 刘 建, 王林元, 张朝阳 (11)
含能材料的相变研究进展	徐维森, 袁姣楠, 张秀清, 胡燕飞, 田 馨, 任海超, 姬广富, 赵 锋 (21)
含能材料量子化学计算方法综述	何 飘, 杨俊清, 李 彤, 张建国 (34)
◆ 分子模拟	
TKX-50 高压下结构、力学性质及电子特性的第一性原理研究	宗和厚, 张伟斌, 李华荣, 张 蕾 (46)
基于自洽力场构建 α 相 RDX 炸药等熵压缩加载线	宋华杰, 李 华, 张 平, 杨延强, 黄风雷 (53)
运用从头算动力学方法研究极端条件下 CL-20 的分解机理	向 东, 吴 琼, 朱卫华 (59)
纳米颗粒形状、尺寸、含量及颗粒级配对炸药悬浮液粘度影响的 DPD 模拟	周 阳, 李奕学, 钱 文, 何 碧 (66)
TKX-50 热分解氮气形成机理的分子动力学模拟	余 一, 张 蕾, 姜胜利, 王 星, 赵寒月, 陈 军 (75)
含能聚合物的热导率的预测	郭旭东, 谭碧生, 黄 忠 (80)
◆ 数值模拟	
烤燃作用下的 HMX 单晶各向异性力学响应及相变	胡惟佳, 吴艳青, 黄风雷 (86)
凝聚相炸药拐角爆轰的数值模拟	王 星, 姜胜利, 赵寒月, 余 一, 张 蕾, 陈 军 (94)
PBX 装药弹体侵入混凝土薄板的数值模拟	张馨予, 吴艳青, 黄风雷 (101)
◆ 读者·作者·编者	
《含能材料》“损伤与点火”征稿(74) 《含能材料》“观点”征稿(85) 《含能材料》“含能共晶”征稿(93)	
专辑导言及客座编审简介(前插一) 计算含能材料学团队(前插二)	

1 Energetic Express

Invited Review

2 ZHANG Chao-yang

On the Energy & Safety Contradiction of Energetic Materials and the Strategy for Developing Low-sensitive High-energetic Materials

Reviews

11 ZHONG Kai, LIU Jian, WANG Lin-yuan,
ZHANG Chao-yang

Issue of 'Hot-Spot' in Energetic Materials: Recent Progresses of Modeling and Calculations

21 XU Wei-sen, YUAN Jiao-nan, ZHANG Xiu-qing,
HU Yan-fei, TIAN Xin, REN Hai-chao, JI Guang-fu,
ZHAO Feng

Review on the Phase Transition of Energetic Materials

34 HE Piao, YANG Jun-qing, LI Tong, ZHANG Jian-guo

Overview on the Quantum Chemical Methods for Energetic Materials

Molecular Simulation

46 ZONG He-hou, ZHANG Wei-bin, LI Hua-rong,
ZHANG Lei

Structural, Mechanical and Electronic Properties of Dihydroxylammonium 5,5'-Bistetrazole-1,1'-diolate (TKX-50) under High Pressures: A First-principles Study

53 SONG Hua-jie, LI Hua, ZHANG Ping,
YANG Yan-qiang, HUANG Feng-lei

Isentropic Compression Loading Locus of α -RDX Based on Its Self-consistent Force Field

59 XIANG Dong, WU Qiong, ZHU Wei-hua

Ab Initio Molecular Dynamics Studies on the Decomposition Mechanisms of CL-20 Crystal under Extreme Conditions

66 ZHOU Yang, LI Yi-xue, QIAN Wen, HE Bi

DPD Simulations on the Effect of Nanoparticle Shapes, Sizes, Contents and Gradations on the Viscosity of Energetic Suspensions

75 YU Yi, ZHANG Lei, JIANG Sheng-li, WANG Xing,
ZHAO Han-yue, CHEN Jun

Molecular Simulation on the Nitrogen Generation in Thermal Decomposition of TKX-50

80 GUO Xu-dong, TAN Bi-sheng, HUANG Zhong

Prediction on Thermal Conductivity of Energetic Polymers

Numerical Simulation

86 HU Wei-jia, WU Yan-qing, HUANG Feng-lei

Anisotropic Mechanical Response and Phase Transition of Cooked HMX

94 WANG Xing, JIANG Sheng-li, ZHAO Han-yue, YU Yi,
ZHANG Lei, CHEN Jun

Numerical Simulations of the Corner Detonation of Condensed Phase Explosives

101 ZHANG Xin-yu, WU Yan-qing, HANG Feng-lei

Numerical Simulation on the Dynamic Damage of PBX Charges Filled in Projectiles During Penetrating Thin Concrete Targets