

EI 收录期刊  
中文核心期刊

ISSN 1006-9941  
CODEN HACAFQ

# 含能材料

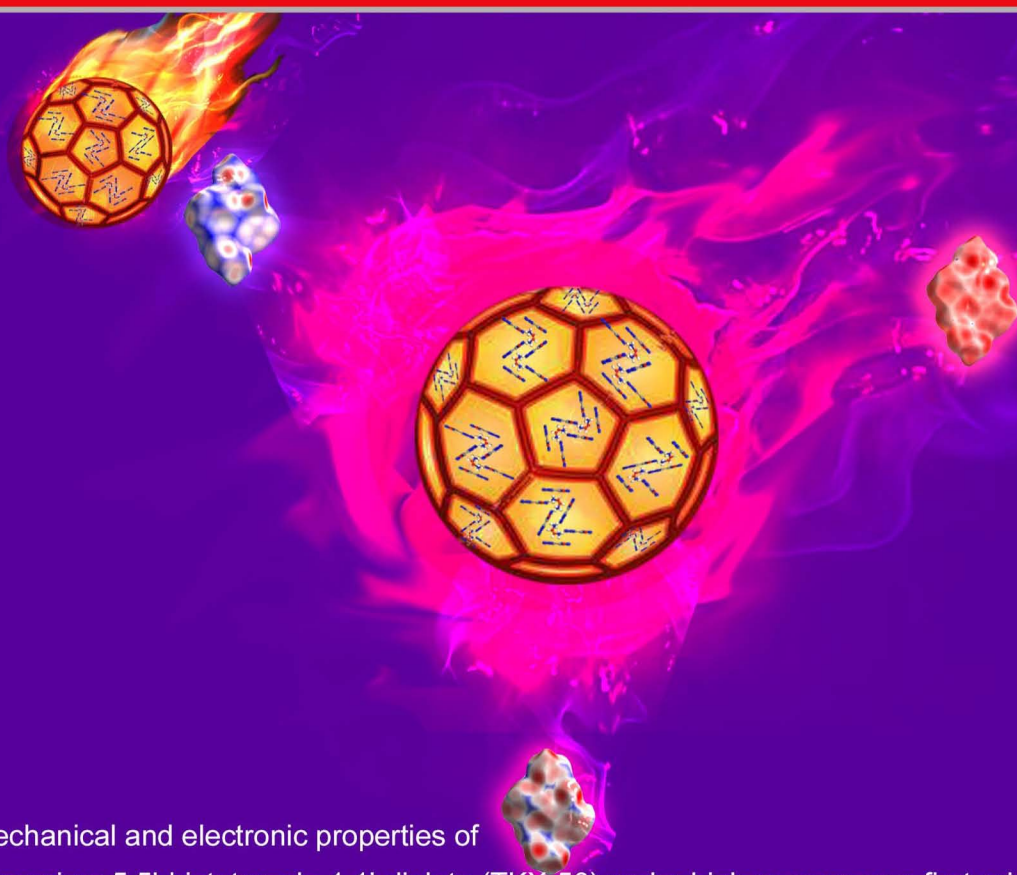
CHINESE JOURNAL OF ENERGETIC MATERIALS

含能材料

二〇一八年

第二十六卷

第一期



Structural, mechanical and electronic properties of dihydroxylammonium 5,5'-bistetrazole-1,1'-diolate (TKX-50) under high pressures: a first-principles study  
TKX-50高压下结构、力学性质及电子特性的第一性原理研究

计算含能材料学专辑

2018  
第26卷 1

# HANNENG CAILIAO

### 《含能材料》第七届编辑委员会

名誉主编	陈能宽 <sup>院士</sup> 中国工程物理研究院 汪旭光 <sup>院士</sup> 北京矿冶研究总院	朱祖良 中国工程物理研究院 李俊贤 <sup>院士</sup> 黎明化工研究院	徐更光 <sup>院士</sup> 北京理工大学 王泽山 <sup>院士</sup> 南京理工大学
特邀顾问	龙新平 中国工程物理研究院 欧育湘 北京理工大学 潘功配 南京理工大学	冯长根 北京理工大学 吕春绪 南京理工大学 胡荣祖 西安近代化学研究所	黄辉 中国工程物理研究院 肖鹤鸣 南京理工大学
主编	田勇 中物院化工材料研究所	李明 中物院化工材料研究所	
执行主编	聂福德 中物院化工材料研究所		
副主编	李金山 中物院化工材料研究所		
委员	(以姓氏笔画为序)		
王伯周	西安近代化学研究所	王彦平	中物院流体物理研究所
王新德	黎明化工研究院	冯顺山	北京理工大学
刘大斌	南京理工大学	刘玉存	中北大学
刘所恩	兴安化学工业集团	孙翔宇	中国航天科工集团六院
阳世清	国防科技大学	余永刚	南京理工大学
张庆华	中物院化工材料研究所	张庆明	北京理工大学
张跃军	南京理工大学	张朝阳	中物院化工材料研究所
杜仕国	石家庄军械工程学院	杨光成	中物院化工材料研究所
汪信	南京理工大学	沈瑞琪	南京理工大学
肖忠良	中北大学	陆明	南京理工大学
陈军	北京应用物理与计算数学研究所	陈朗	北京理工大学
庞爱民	中国航天科技集团四院 42 所	罗运军	北京理工大学
赵凤起	西安近代化学研究所	赵孝彬	中国航天科技集团四院 42 所
唐承志	中国航天科技集团四院 42 所	徐抗震	西北大学
顾文彬	解放军理工大学	曹瑞林	中北大学
符全军	中国航天科技集团 165 所	黄风雷	北京理工大学
焦清介	北京理工大学	葛忠学	西安近代化学研究所
裴重华	西南科技大学	潘仁明	南京理工大学
Alf Prytz	Bofors AB, Sweden	Ang How Ghee	Nanyang Technological University, Singapore
Carlos Miró Sabaté	University of Lyon, France	Colclough Eamon	Technical Manager/Energetic Materials, UK
Chang-ha Lee	Yonsei University, South Korea	I.V. Tselinskii	Petersburg Institute of Technology Russia, Russia
Mitsuo Koshi	Tokyo University, Japan	Paul Wanninger	PWX GmbH, Germany
Pharis E. Williams	Williams Research Corporation, USA	Svatopluk Zeman	Institute of Energetic Materials (IEM), Czech Republic
Glotov Oleg	Tomsk state university, Russian	Manfred Bohn	Fraunhofer Institute for Chemical Technology, Germany
Michael Gozin	Tel Aviv University, Israeli		

### 含能材料

1993 年创刊 (月刊)

2018 年 第 26 卷 第 1 期 (总第 147 期) 2018 年 1 月 25 日

主办单位 中国工程物理研究院  
主管单位 四川省科协  
出版单位 中国工程物理研究院化工材料研究所  
《含能材料》编辑部  
通信地址 四川省绵阳市 919 信箱 310 分箱, 621999  
电话: 0816-2485362 传真: 0816-2495856  
e-mail: HNCL01@caep.cn  
主 编 田 勇  
责任编辑 张 琪 王艳秀 高 毅 姜 梅  
印刷装订 绵阳市精典彩印厂  
国内发行 绵阳市邮政局报刊发行公司 (全国各地邮局订阅)  
国外发行 中国国际图书贸易总公司 (北京车公庄西路 35 号, 100048)  
发行范围 国内外公开发行  
刊 号 ISSN 1006-9941  
CN 51-1489/TK

国内邮发代号 62-31

国外发行代号 4681MO

### CHINESE JOURNAL OF ENERGETIC MATERIALS

Established in 1993 (Monthly)

Vol.26, No.1 2018 (Sum No. 147) 25 January, 2018

Sponsored by CAEP  
Managed by SCSA  
Edited by Editorial Board of  
**CHINESE JOURNAL OF ENERGETIC MATERIALS**  
P.O.BOX 919-310, Mianyang, Sichuan, China  
Postcode 621999  
Tel: +86-816-2485362 Fax: +86-816-2495856  
e-mail: HNCL01@caep.cn  
http://www.energetic-materials.org.cn  
Editor-in-Chief: TIAN Yong  
Executive Editor: ZHANG Qi WANG Yan-xiu GAO Yi JIANG Mei  
Printed by Mianyang Jingdian Color Printing House  
Domestic Distribution: Post Office in Mianyang  
Foreign Distribution: China International Book Trading Corporation  
(35 Chegongzhuang Xilu, Beijing 100048, China)

国内定价 20 元/期

1. 所投稿件不得涉及国家秘密,投稿时请务必提供您所在单位的保密审查意见,证明稿件无泄密、侵权、署名争议等问题,本刊不接受无保密审查意见的投稿。
2. 投稿前请认真阅读本刊的版权转让协议(本刊网站),不得一稿多投,保证做到其中的规定。
3. 请登录本刊网站投稿。本刊不接受其他形式的投稿。
4. 第一作者和通讯作者简介(姓名、出生年、性别、学历、职称、研究方向,e-mail 地址)、标准基金全称及批准号以脚注形式统一写在首页。基金和重点攻关项目支持的论文,请注明。
5. 稿件主要形式为观点、研究论文、综述、研究快报等。观点要求学术观点鲜明,内容新颖,形式短小精悍。研究论文应具有原创性和系统性的实验或理论研究成果。综述是对当前含能材料某一研究领域,特别是研究领域热点的、权威的、公正的学术调查、评述与总结,主要由本刊特邀国内外知名学者撰写,也接受自由投稿。研究快报要求是本领域的最新研究成果,英文撰稿,省部级以上基金支持。
6. 题名简明(中文不超过 20 个汉字,英文不超过 10 个实词为宜,每个实词的第一个字母大写),避免使用含义笼统的词语和非公知公用的缩略语、字符、代号以及结构式和公式。
7. 摘要包含目的、方法、结果与结论四要素,其中结果和结论最重要,应具有独立性和自明性。采用第三人称撰写,如“采用……方法对……进行了研究”。结果应尽量定量说明,结论简明确切。不使用“本文”、“作者”等作主语。不出现图表、冗长的数学公式,非公知公用的符号、缩略语等首次出现时须给出全称,不引用参考文献,不对论文内容作诠释和评论。中文摘要以 400 字左右为宜。英文摘要也应包含四要素,句型简单完整,主谓齐全,术语准确,符合英语语法,取消一些不必要的词句,如 *this paper* 等,实验方法用一般过去时,结果用一般现在时,以 300~500 词、10~15 个完整句子为宜。如摘要不符合规定,本刊将不予以接受。
8. 本刊接受高质量的英文稿件,请附相应的中文摘要、题名、作者单位及关键词。
9. 请提供英文图文摘要。用简短的文字点明论文的研究主题,以引导读者阅读。图(一幅,最多两幅)的选取,以能反映全文要点的简图或示意性说明(如公式、反应式、线条图等)为佳(没有图也可),图文摘要不谈结论和结果,说明做了什么即可。
10. 参考文献按 GB/T 7714-2005《文后参考文献著录规则》要求著录。参考文献中作者多于 3 人的,请写出前 3 人姓名,后加“等”或“et al”,作者少于 3 人的,请写出所有作者姓名。外籍作者姓名,请按先姓后名并省略缩写点的原则书写(如, Kamlet M J)。对于中文期刊文献,本刊要求提供相应英文。期刊的英文名称请用斜体,实词首字母大写。
11. 关于投稿的详细信息,请参照本刊网站的投稿须知。

《含能材料》(Chinese Journal of Energetic Materials)1993年创刊,1996年国内外公开发行人。中国工程物理研究院主办,中国工程物理研究院化工材料研究所承办,主要报道的内容为:

- (1) 含能材料(炸药、推进剂、烟火剂、火工药剂)的合成、制备与性能表征;
- (2) 含能材料(单质与配方)的理论设计与数值模拟;
- (3) 含能材料用相关材料的合成、制备、性能与应用技术;
- (4) 含能材料的安定性、相容性、老化特性研究;
- (5) 燃烧、爆炸、冲击的理论及实验研究;
- (6) 弹药毁伤特性、安全性、环境适应性、可靠性及防护技术;
- (7) 含能材料的装药、成型与加工制造技术;
- (8) 含能危险物质的理化分析、毒理特性、环境化学与绿色无害化处理技术;
- (9) 本学科领域的研究动态、评述、会讯、书评与杰出专家等报道;
- (10) 本学科领域的科研机构、科学仪器、软件与出版机构等介绍。

目前,《含能材料》是中文核心期刊(北大)、中国科技核心期刊(中国科技信息研究所)、中国科学引文数据库源刊(中国科学院)、中国学术期刊综合评价数据库源刊、中国学术期刊(光盘版)源刊、中国知网源刊、万方数据库源刊、中文科技期刊数据库源刊、中国化学文献数据库源刊,同时还被《EI》、《CA》、《剑桥科学文摘》(CSA)、《俄罗斯文摘》(AJ)、《日本科学技术振兴集团数据库》(JST)、《中国学术期刊文摘》、《中国导弹与航天文摘》及《兵工文摘》等收录。

本刊网站 <http://www.energetic-materials.org.cn> 已开通,实现了网上投稿、审稿、查询稿件状态、清样校核、版面费通知等信息化管理模式。

## 重要声明

目前,《含能材料》已加入中国知网、万方数据资源系统(ChinaInfo)数字化期刊群、中文科技期刊数据库、CEPS中文电子期刊,可以通过数据库及互联网提供全文或题录检索。

第一作者代表全体作者同意将在本刊发表的论文,于印刷前在中国学术期刊(光盘版)电子杂志社主办的中国知网上予以优先数字出版;许可该社在全球范围内使用该文的信息网络传播权、数字化复制权、数字化汇编权、发行权、翻译权。

本刊所付稿酬已包含刊物内容进入数据库及上网服务的报酬。如作者不同意将文章入编以上数据库,请在来稿时声明。

刊名题写 陈能宽院士



网站二维码



微信公众号

**CHINESE JOURNAL OF ENERGETIC MATERIALS**

[www.energetic-materials.org.cn](http://www.energetic-materials.org.cn)

国际标准连续出版物号 **ISSN 1006-9941**

国内邮发代号 62-31

国内定价 20 元/期 240 元/年

国内统一连续出版物号 **CN 51-1489/TK**

国外发行代号 4681MO

公开发行：未经许可，任何单位或个人不得以任何形式转载、摘编本刊所刊载的论文。

**ISSN 1006-9941**

