

本期 导言

计算含能材料学是一门由计算科学与含能材料学发展交叉而成的科学，其发展必将促进计算科学和含能材料学的发展。对于投入大、风险高的含能材料，计算的作用就显得异常重要。事实上，计算和实验及数据库紧密结合，已成为科学研究的主要趋势，计算含能材料学必将在含能材料研究中发挥越来越重要的作用。为此，特组稿“计算含能材料学”专辑，本专辑共 13 篇文章，包括 1 篇评论、3 篇综述和 9 篇研究论文。文章内容涵盖了含能材料的结构、能量、安全性与其对热力响应，跨越了微观、介观和宏观尺度。通过这些文章，我们将领略作者对含能材料中一些热点问题的归纳总结和思考，如，“能量与安全性间矛盾”、“热点的形成机制”、“热力响应机制”、“侵彻机制”等。我们希望通过本专辑的出版，传播，促进中国计算含能材料学的发展。

张朝阳

客座编审张朝阳：中国工程物理研究院化工材料研究所研究员，博士生导师。复旦大学物理化学博士毕业。中国化学会燃烧化学专业委员会成员，火

第四届计算含能材料学论坛 四川·成都 2017.7



炸药燃烧国防科技重点实验室学术委员会成员，中物院科学技术委员会材料与化学专业组成员，北京计算科学研究中心客座研究员，重庆大学、西南科技大学兼职研究生导师，《含能材料》编委。发起并主办全国性的学术会议

“计算含能材料学论坛”。此论坛已连续成功召开了四届，并成为国内计算含能材领域交流的盛会。承担国家自然科学基金和各类预研等课题共 30 余项。在 Journal of the American Chemical Society、the Journal of Physical Chemistry A/B/C、Physical Chemistry Chemical Physics、ACS Applied Materials & Interfaces、Crystal Growth & Design、CryEngComm、Journal of Computational Chemistry 等期刊上发表论文 100 余篇。获“于敏数理奖”、“邓稼先青年科技奖”和“中物院科技创新一等奖”。

