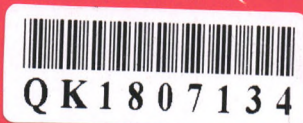


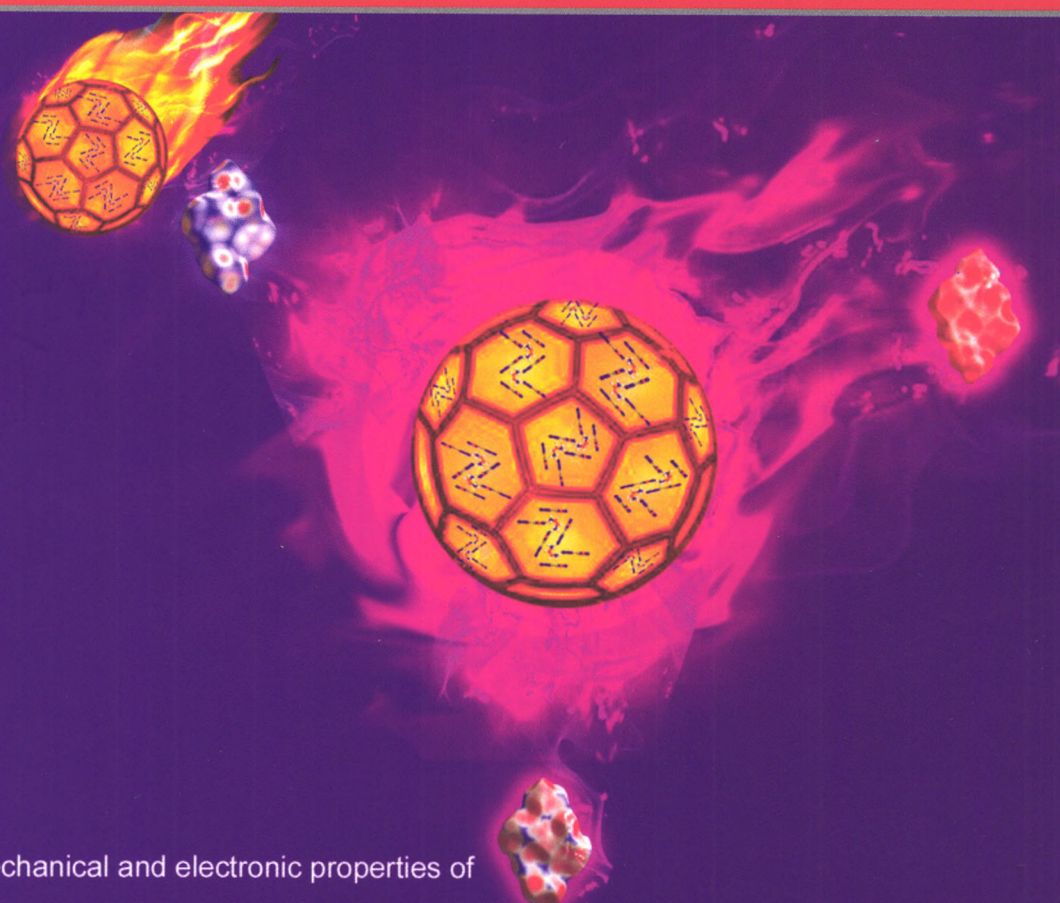
EI 收录期刊
中文核心期刊

ISSN 1006-9941
CODEN HACAQ



含能材料

CHINESE JOURNAL OF ENERGETIC MATERIALS



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

万方数据

* 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 装药弹体侵彻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)

期刊基本参数: CN 51-1489/TK ※ 1993 ※ m ※ A4 ※ 88※ zh+en ※ P ※ ¥20.00 ※ 700 ※ 13 ※ 2018-1

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



网站二维码



微信公众号

CHINESE JOURNAL OF ENERGETIC MATERIALS
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		

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

ISSN 1006-9941



9 771006 994181



0 1>