

中国科技核心期刊
中文核心期刊

ISSN 1001-246X
CN 11-2011/O4
CODEN JIWUEP

计算物理

CHINESE JOURNAL OF
COMPUTATIONAL PHYSICS

第 34 卷 第 6 期 (卷终)

Vol. 34 No. 6

6

2017

ISSN 1001-246X



中国核学会
计算物理编辑委员会

目 次

DG 方法求解可压缩气固两相流动 段茂昌 蔚喜军 陈大伟 黄朝宝 安娜(631)

典型自由面流动问题的 SPH-ALE 数值模拟 上官子柠 周秀丽 宋鑫 陈谦(641)

湍流热对流的高效并行直接求解方法 包芸 叶孟翔 罗嘉辉(651)

大雷诺数 Navier-Stokes 方程的两水平亚格子模型稳定化方法 杨晓成 尚月强(657)

二维 Helmholtz 边界超奇异积分方程解析研究 王现辉 郑兴帅 乔慧 张小明(666)

复杂色散介质电磁特性分析的扩展 Newmark-FDTD 方法 张玉强(673)

AuCl₃催化炔酮分子内环化反应的机理 李安军 朱元强 苏鸿 杨泽宏(679)

Matlab 编程的 Hückel 分子轨道法计算研究掺杂纳米碳管的化学反应性(英)
..... 杨龙飞 张业新 都时禹(696)

支撑材料基因工程的高通量材料集成计算平台
..... 杨小渝 王娟 任杰 宋健龙 王宗国 曾雉 张小丽 黄孙超 张平 林海青(697)

元素替代对 MgH₂ 储氢材料释氢影响机理的第一原理研究 麻洪吉 张国英 方戈亮(705)

Zn 空位对 Al-P 共掺杂 ZnO 电子结构影响的第一性原理计算 ... 李磊磊 李维学 戴剑锋 王青(713)

单轴应变对氮化镓电子结构及光学性质的影响 温淑敏 姚世伟 赵春旺 王细军 侯清玉(722)

一种针对弱场搜寻态冷极性分子的可控静电表面囚禁方案 李胜强(731)

混合粒子群算法 ADPSO 对月球物理参数反演的改进 钟振(740)

忆阻器混沌电路产生的共存吸引子与 Hopf 分岔 王伟 曾以成 陈争 孙睿婷(747)

CHINESE JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS

Vol. 34, No. 6, 2017

CONTENTS

Research Reports

- DG method for compressible gas–solid two–phase flow
..... DUAN Maochang, YU Xijun, CHEN Dawei, HUANG Chaobao, AN Na(640)
- Numerical simulation of typical free surface flow with SPH–ALE
..... SHANGGUAN Zining, ZHOU Xiuli, SONG Xin, CHEN Qian(650)
- An efficient parallel direct method for turbulent thermal convection
..... BAO Yun, YE Mengxiang, LUO Jiahui(656)
- Two–level subgrid stabilized methods for Navier–Stokes equations at high Reynolds numbers
..... YANG Xiaocheng, SHANG Yueqiang(665)
- Analytical study of hypersingular integral equations with constant element for 2D Helmholtz problems
..... WANG Xianhui, ZHENG Xingshuai, QIAO Hui, ZHANG Xiaoming(672)
- Extended Newmark–FDTD method for analysis of electromagnetic characteristics of complex dispersive media ...
..... ZHANG Yuqiang(678)
- Mechanism of acetylenic–keton intramolecular cyclization reaction catalyzed by AuCl₃
..... LI Anjun, ZHU Yuanqiang, SU Hong, YANG Zehong(684)
- Study of chemical reactivity of doped carbon nanotubes by simple Hückel molecular orbital calculations with Matlab programming
..... YANG Longfei, ZHANG Yexin, DU Shiyu(685)
- An integrated high–throughput computational material platform
..... YANG Xiaoyu, WANG Juan, REN Jie,
SONG Jianlong, WANG Zongguo, ZENG Zhi, ZHANG Xiaoli, HUANG Sunchao, ZHANG Ping, LIN Haiqing(704)
- First–principles study on dehydrogenation ability of MgH₂ hydrogen storage materials with component element substitution
..... MA Hongji, ZHANG Guoying, FANG Geliang(712)
- Effects of zinc vacancies on electronic structure of Al–P co–doped ZnO: First–principles calculations
..... LI Leilei, LI Weixue, DAI Jianfeng, WANG Qing(721)
- Effect of uniaxial strain on electronic structure and optical properties of InN
..... WEN Shumin, YAO Shiwei, ZHAO Chunwang, WANG Xijun, HOU Qingyu(730)
- A controllable electrostatic well for cold polar molecules in weak field seeking state on a chip
..... LI Shengqiang(739)
- Lunar geophysical parameter inversion with admixed particle swarm optimization ADPSO ... ZHONG Zhen(746)
- Coexisting attractors and Hopf bifurcation in floating memristors based chaotic circuit
..... 万方数据..... WANG Wei, ZENG Yicheng, CHEN Zheng, SUN Ruiting(756)