

[设为首页](#) | [加入收藏](#)



[首页](#) [学院概况](#) [党群工作](#) [师资队伍](#) [专业建设](#) [教学教研](#) [科学研究](#) [学生工作](#) [材料人文](#)

您好，欢迎访问南京工程学院 材料学院网站！ 今天是： 2021年1月12日 星期二

师资队伍

[首页](#) > [师资队伍](#) > [正文](#)

师资概况

人才工程

教师信息

吴琼



主要简介:

吴琼，博士，副教授，National University of Singapore访问学者。主持江苏省自然科学基金、江苏省先进结构材料及应用技术重点实验室基金、南京工程学院自然科学基金重大项目、南京工程学院高等教育研究课题，参与国家自然科学基金，江苏省优秀青年基金等项目。近几年以第一作者发表SCI期刊收录论文20余篇。获江苏省优秀博士学位论文，南京工程学院优秀班主任、优秀毕业设计指导教师、青年教师优秀教案

二等奖、青年教师讲课大赛三等奖和大学生科技创新活动优秀指导教师等。指导本科生发表SCI期刊论文6篇，并获南京工程学院大学生课外学术科技作品竞赛特等奖和大学生创新创业教育成果展专利一等奖等。指导本科班级毕业率100%、考研达线率56.1%，并获优秀班集体和考研先进班集体。

联系方式：南京市江宁科学园弘景大道1号工程中心5-341，邮编211167；手机15295537821，邮箱qwu@njit.edu.cn

主研方向：高能量密度材料的理论设计；化学合成反应的计算和模拟；复合材料的结构模拟和性能预测；合金缓蚀剂的分子设计及其作用机理理论研究。

在研项目：

[1] 江苏省自然科学基金青年基金：适用于高能量密度材料的金属有机骨架化合物的理论设计及性能计算(BK20170761)，2017.7-2020.6，20万，主持；

[2] 江苏省重点实验室开放基金：医用可降解镁稀土合金的结构设计和强韧化理论研究，2018.1-2019.12，1.5万，主持；

[3] 南京工程学院自然科学基金重大项目：稀土掺杂生物镁合金的设计、制备和性能研究，2017.1-2019.12，6.0万，主持；

[4] 南京工程学院自然科学基金：超高能金属有机框架化合物的设计及构效关系理论研究，2019.1-2020.12，1.0万，主持；

[5] 校企合作项目：环氧丁烷类含能材料性能理论预估研究，2019.6-2020.5，8.0万，主持。

最近发表文章(第一作者)：

[1] Qiong Wu, Mingquan Li, Qinnan Hu, Zewu Zhang, Weihua Zhu. First-principle study and Hirshfeld surface analysis on the effect of H₂O, NH₃ and H₂S on structural, electronic, elastic, optical and thermodynamic properties

of a novel high-energy crystal 2,4,6-triamino-5-nitropyrimidine-1,3-dioxide, *Journal of Materials Science*, 2020, 55, 237-249.

[2] Qiong Wu, Qidi Li, Gaojie Yan, Zewu Zhang, Weihua Zhu. Molecular design of novel super high energy compounds by incorporating the difluoramino group, N-oxide and different bridge groups into the 1H-tetrazole, *Journal of Fluorine Chemistry* 2019, 218: 21-26.

[3] Qiong Wu, Zewu Zhang, Bo Kou, Weihua Zhu. A DFT study of the structure-property relationships of bistetrazole-based high-nitrogen energetic metal complexes[J]. *Journal of molecular modeling*, 2018, 24(5): 119.

[4] Qiong Wu, Bo Kou, Zewu Zhang, Weihua Zhu. The search for new powerful energetic transition metal complexes based on 3, 3'-dinitro-5, 5'-bis-1, 2, 4-triazole-1, 1'-diolate anion: a DFT study[J]. *Journal of molecular modeling*, 2017, 23(9): 254.

[5] Qiong Wu, Weihua Zhu, Heming Xiao. Cooperative effects of different temperatures and pressures on initial and subsequent decompositions of nitrogen-rich energetic crystal 3,3'-dinitroamino-4,4'-azoxyfuran, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2016, 18: 7093-7099

[6] Qiong Wu, Hao Chen, Guolin Xiong, Weihua Zhu, Heming Xiao. Decomposition of a 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene crystal at decomposition temperature coupled with different pressures: an ab Initio molecular dynamics study, *Journal of Physical Chemistry C*, 2015, 119: 16500-16506

[7] Qiong Wu, Guolin Xiong, Weihua Zhu, Heming Xiao. How does low temperature coupled with different pressures affect initiation mechanisms and subsequent decompositions in nitramine explosive HMX?, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015, 17: 22823-22831

[8] Qiong Wu, Weihua Zhu, Heming Xiao. A new design strategy for high-energy low-sensitivity explosives: combining oxygen balance equal to zero, a combination of nitro and amino groups, and N-oxide in one molecule of 1-amino-5-nitrotetrazole-3N-oxide, *Journal of Materials Chemistry A*, 2014, 2: 13006-13015

[9] Qiong Wu, Weihua Zhu, Heming Xiao. Ab initio molecular dynamics study of thermal decomposition of 3,6-di(azido)-1,2,4,5-tetrazine, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2014, 16: 21620-21628

[10] Qiong Wu, Weihua Zhu, Heming Xiao. Structural transformations and absorption Properties of crystalline 7-amino-6-nitrobenzodifuroxan under high pressures, *Journal of Physical Chemistry C*, 2013, 117: 16830-16839.


发布时间: 2019-12-13 浏览: 1134次

上一篇: 李晓泉

下一篇: 杨宗辉

[学院概况](#) [党群工作](#) [师资队伍](#) [专业建设](#) [教学教研](#) [科学研究](#) [学生工作](#) [材料人文](#)

地 址: 南京市江宁科学园弘景大道一号 邮编: 211167

Copyright © 2010-2014 南京工程学院材料学院 All Rights Reserved 版权所有: 南京工程学院材料学院 苏ICP备05007116号-1  苏公网安备 32011502010453号