

原子与分子物理学报

(Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao)

(双月刊 1984 年创刊)

2024 年 第 41 卷 第 6 期

目 次

· 原子、分子结构与光谱 ·

- 061001 Z 型 InN/SnS₂ 范德华异质结增强光催化水分解 戴卓旒, 盛 威, 许 英
- 061002 基于密度泛函理论下 O 和 Na 掺杂单层 h-BN 的电子结构和光学性质的分析 周国建, 彭章娥, 刘 琳, 等
- 061003 NO 与 SH 自由基反应机理及动力学研究 郝 昊, 周 璐, 史韶旭, 等
- 061004 香豆素 C545T 红外光谱的理论计算和实验研究 练何华, 吕昭月, 邹若雨, 等
- 061005 应变对析氢反应催化剂 TiC₂ 性能影响的研究 孙楠楠, 赵志超, 赵翠莲, 等
- 061006 银杏内酯分子结构和光谱性质的理论研究 李丽华, 魏 冉, 张 鑫, 等
- 061007 ITO 负载单原子钷吸附 NO 和 CO 的第一性原理研究 曹 宇, 吴海龙, 邱 辰, 等

· 团簇与纳米结构 ·

- 062001 氢分子在 Na₂Al₆ 团簇上的吸附和解离性能 仝小刚, 马维红, 薛玉峰, 等
- 062002 Mo_n (n = 2 - 13) 和 Mo_nC (n = 1 - 12) 团簇的几何结构和电子结构 杨文辉, 相 悦, 陈 轩, 等
- 062003 单轴拉伸下氧化锆纳米柱相变机理的分子动力学研究 钟金豹, 李 磊, 窦永晖, 等
- 062004 孔洞缺陷对二维石墨烯/氮化硼横向异质结热传导的调控 翟方园, 张定波, 曹增强, 等
- 062005 导电石墨烯孔道内双电层结构的研究 董 乐, 蒋更平

· 等离子体及原子分子碰撞过程 ·

- 063001 近 Bohr 速度¹²⁹Xe⁹⁺ 离子入射 Ta 靶发射近红外光谱线 王益军, 张 颖, 张小安, 等

· 极端条件下的原子分子物理 ·

- 064001 高温高压下液态 Fe - 8.6 wt% Si 的声速和密度: 富 Si 地核的证明 吴少白, 周亮亮, 刘 勋, 等
- 064002 两态模型中的振动态布居转移 胡晋伟, 雷永清, 张 华

· 量子光学与量子信息 ·

- 065001 Three-qubit 海森堡 XYZ 各向异性自旋链系统 QMA 熵不确定度的量子调控 刘科洋, 周清平

065002 交叉克尔非线性对二阶非线性诱导透明的影响 孟楠

· 原子分子物理交叉学科 ·

066001 Ni_4Ti_3 沉淀相对 NiTi 形状记忆合金相变行为的影响 郑焯昆, 赵睿东, 于超

066002 模型化研究高分子凝胶体积相变中的共非溶性作用 李康睿, 李循, 王书恒, 等

066003 基于择优掺杂取向研究 Y 掺杂量对 ZnTe 电子结构和吸收光谱的影响 李昊男, 李聪

066004 过渡金属 W、Mn、V、Ti 掺杂二维材料 MoSi_2N_4 的第一性原理计算 姚登浪, 黄泽琛, 郭祥, 等

066005 二维 Ag_2S 的电子和光电性能的第一性原理研究 相悦, 张川川, 杨文辉, 等

066006 三元混合制冷剂 R290 + R600a + N_2 汽液相平衡实验研究 韩树康, 祁影霞, 杨瀚宁, 等

066007 孔洞对 FeCrNiCoCu 高熵合金拉伸性能影响的分子动力学研究 朱璞洁, 杨龙龙, 张靓, 等

CONTENTS

• Atomic and Molecular Structure and Spectroscopy •

- 061001 Z - scheme InN/SnS₂ van der Waals heterojunction increases photocatalytic overall water splitting
DAI Zhuo-Ni, SHENG Wei, XU Ying
- 061002 Analysis of electronic structures and optical properties of O and Na doped monolayer h - BN based on density functional theory *ZHOU Guo-Jian, PENG Zhang-E, LIU Lin, et al*
- 061003 Study on reaction mechanism and kinetics of NO and SH radical *HAO Hao, ZHOU Lu, SHI Shao-Xu, et al*
- 061004 Theoretical calculation and experimental study on infrared spectra of coumarin C545T
LIAN He-Hua, LÜ Zhao-Yue, ZOU Ruo-Yu, et al
- 061005 Investigation of strain effect on hydrogen evolution reaction catalysts of TiC₂
SUN Nan-Nan, ZHAO Zhi-Chao, ZHAO Cui-Lian, et al
- 061006 Theoretical study on molecular structures and spectral properties of ginkgolides
LI Li-Hua, WEI Ran, ZHANG Xin, et al
- 061007 Single-atom Y supported on ITO surface for NO and CO gases adsorption; a first-principles study
CAO Yu, WU Hai-Long, QIU Chen, et al

• Cluster and Nanostructure •

- 062001 Adsorption and dissociation properties of molecular hydrogen on Na₂Al₆ cluster
TONG Xiao-Gang, MA Wei-Hong, XUE Yu-Feng, et al
- 062002 Geometric and electronic structures of Mo_n (n = 2 - 13) and Mo_nC (n = 1 - 12) clusters
YANG Wen-Hui, XIANG Yue, CHEN Xuan, et al
- 062003 Molecular dynamics study on phase transition mechanism of tetragonal zirconia nanorods under uniaxial tension ...
ZHONG Jin-Bao, LI Lei, DOU Yong-Hui, et al
- 062004 The control of thermal conductivity in two-dimensional graphene / hexagonal boron nitride lateral heterostructures by pore defects *ZHAI Fang-Yuan, ZHANG Ding-Bo, CAO Zeng-Qiang, et al*
- 062005 Study onelectric double layers inside the conducting graphene nanopores *DONG Le, JIANG Geng-Ping*

• Plasmas and Atomic and Molecular Collisions •

- 063001 Atomic and ionic near infrared emission spectra induced by the impact of ¹²⁹Xe^{q+} on Ta solid surface
WANG Yi-Jun, ZHANG Ying, ZHANG Xiao-An, et al

• Atomic and Molecular Physics under Extreme Condition •

- 064001 Soundvelocities and densities of liquid Fe - 8. 6 wt% Si under high pressure and temperature; Implications for a Si - rich core *WU Shao-Bai, ZHOU Liang-Liang, LIU Xun, et al*

064002 The vibrational population transfer in two-state model *HU Jin-Wei, LEI Yong-Qing, ZHANG Hua*

· **Quantum Optics and Quantum Information** ·

065001 Quantum regulation of QMA entropy uncertainty in three-qubit Heisenberg XYZ anisotropic spin chain system ...
LIU Ke-Yang, ZHOU Qing-Ping

065002 Effect of cross-Kerr nonlinearity on second – order nonlinearity induced transparency *MENG Nan*

· **Interdisciplinary Subject with Atomic and Molecular Physics** ·

066001 Effect of Ni_4Ti_3 precipitates on phase transformation behavior of NiTi superelastic shape memory alloy
ZHENG Ye-Kun, ZHAO Rui-Dong, YU Chao

066002 Modeling study on the roles of co-nonsolvency in volume transition of polymer gels
LI Kang-Rui, LI Xun, WANG Shu-Heng, et al

066003 Study of the effect of Y doping amount on the electronic structure and absorption spectrum of ZnTe based on selective doping orientation *LI Hao-Nan, LI Cong*

066004 First-principles calculation of two-dimensional $MoSi_2N_4$ doped with transition metals W, Mn, V and Ti
YAO Deng-Lang, HUANG Ze-Chen, GUO Xiang, et al

066005 First-principles study of electronic and optical properties of two-dimensional Ag_2S
XIANG Yue, ZHANG Chuan-Chuan, YANG Wen-Hui, et al

066006 Measurement of vapor liquid equilibrium for ternary refrigerant mixture R290 + R600a + N_2
HAN Shu-Kang, QI Ying-Xia, YANG Han-Ning, et al

066007 Molecular dynamics study on the effect of voids on the tensile properties of FeCrNiCoCu high-entropy alloy
ZHU Pu-Jie, YANG Long-Long, ZHANG Liang, et al

《原子与分子物理学报》

编辑委员会

Editorial Board of

Journal of Atomic and Molecular Physics

创刊主编 **Founding Editor**

苟清泉 GOU Qing-Quan

主 编 **Editors**

李家明 LI Jia-Ming 赵伊君 ZHAO Yi-Jun

常务主编 **Administrative Editor**

陈向荣 CHEN Xiang-Rong

顾问编委 **Advisory Board** (按汉语拼音顺序排列)

张图南 CHANG Tu-Nan

侯建国 HOU Jian-Guo

马琰铭 MA Yan-Ming

大谷俊介 OHTANI Shunsuke

潘建伟 PAN Jian-Wei

王广厚 WANG Guang-Hou

威廉斯吉姆 WILLIAMS Jim

杨金龙 YANG Jin-Long

杨学明 YANG Xue-Ming

叶朝辉 YE Zhao-Hui

张 杰 ZHANG Jie

朱清时 ZHU Qing-Shi

编 委 **Editorial Board** (按汉语拼音顺序排列)

蔡灵仓 CAI Ling-Cang

蔡晓红 CAI Xiao-Hong

陈其峰 CHEN Qi-Feng

陈向军 CHEN Xiang-Jun

陈向荣 CHEN Xiang-Rong

陈徐宗 CHEN Xu-Zong

程新路 CHENG Xin-Lu

崔执凤 CUI Zhi-Feng

戴长建 DAI Chang-Jian

丁大军 DING Da-Jun

董晨钟 DONG Chen-Zhong

高 涛 GAO Tao

苟秉聪 GOU Bing-Cong

韩小英 HAN Xiao-Ying

胡翠娥 HU Cui-E

胡 湛 HU Zhan

姬广富 JI Guang-Fu

贾锁堂 JIA Suo-Tang

蒋 刚 JIANG Gang

江玉海 JIANG Yu-Hai

金明星 JIN Ming-Xing

邝小渝 KUANG Xiao-Yu

李 哲 LI Zhe

柳福提 LIU Fu-Ti

刘伍明 LIU Wu-Ming

刘中利 LIU Zhong-Li

马凤才 MA Feng-Cai

马新文 MA Xin-Wen

莫宇翔 MO Yu-Xiang

宋凤麟 SONG Feng-Lin

孙金锋 SUN Jin-Feng

孙卫国 SUN Wei-Guo

王传奎 WANG Chuan-Kui

王海燕 WANG Hai-Yan

王建国 WANG Jian-Guo

王新强 WANG Xin-Qiang

魏冬青 WEI Dong-Qing

颜 君 YAN Jun

杨维清 YANG Wei-Qing

杨向东 YANG Xiang-Dong

袁建民 YUAN Jian-Min

苑晓丽 YUAN Xiao-Li

曾召益 ZENG Zhao-Yi

詹明生 ZHAN Ming-Sheng

张 茹 ZHANG Ru

张 伟 ZHANG Wei

张卫平 ZHANG Wei-Ping

郑雨军 ZHENG Yu-Jun

赵纪军 ZHAO Ji-Jun

周 思 ZHOU Si

朱 俊 ZHU Jun

《原子与分子物理学报》征稿简则

《原子与分子物理学报》是四川省物理学会和四川大学联合主办的专业性学术刊物,主要报导原子与分子物理及其交叉学科(包括:凝聚态物理、激光物理、等离子体物理、光学、化学物理、非线性动力学等)的理论、实验及其应用等方面的研究成果和进展。

1. 开设栏目

1.1 研究论文:透彻、完整、清晰地报导具有学术价值的新的实验、理论结果和进展。研究论文一般分引言、理论或实验方法、结果与讨论、结论等部分,不超过8000字。要求在引言及相关部分对该研究内容相关的背景及现状、本工作所解决的问题及意义有清楚、简洁和客观的叙述。

1.2 快报:快速、简要地报道新的实验、理论结果。快报正文内容不分章节,一般不超过6000字。一旦被接受,将在6个月之内发表,作者可将其更为详细的内容投往国内外其它期刊。

1.3 综合评述:对变化较快的各相关领域的研究进展做出评述。综合评述一般不超过10000字,必须有作者对该领域的较为独到的、具有个人特色的批评性意见和展望。

2. 稿件要求

2.1 标题、作者、单位、摘要及关键词要求用中英双语表示。题目应以简明、确切的词语反映文中最重要的内容,避免使用非标准的缩略语以及结构式和公式。中国作者姓名采用汉语拼音。单位必须写出全称,所在城市和邮政编码。摘要应体现稿件的研究目的,方法,主要结果和结论等,不使用图表、公式,不采用非标准的术语、缩写词等。应精选出反映稿件内容的中、英文关键词各3~6个,按其重要性排列,分别列于中、英文摘要后。另外,请注明中图分类号代码。

2.2 中文标准基金全称及批准号、作者简介、通讯作者信息一律在首页用中文脚注标注。作者简介内容包括:姓名、出生年、性别、民族(汉族可省)、籍贯、职称、最高学历(可省,但在读研究生需标注)、研究方向和E-mail地址等。通讯作者应标注其E-mail地址。

2.3 使用国际标准的缩略词、符号和计量单位系统时,全文要一致。摘要和正文中的缩略词在首次出现时须写出全称,后附缩略词,并用圆括号括起,此后可直接引用。应严格执行GB3100~3102-93有关法定计量和单位的规定。单位符号一律用正体,变量的符号(包括下标)需用斜体。

2.4 插图(照片)、表具有自明性,并按出现的先后次序顺序编号。在论述中应先文后图、表。中文稿件中,插图(照片)、表标题应同时采用中英文双语表示。插图(照片)、表头的量或用来标记图形轴线的量,用“量符号/单位标准化符号”形式标记。表应置于正文相应位置处,用三线表,必要时可加辅助线。若有表注,可写在表底线左下侧。插图曲线要求墨色均匀、粗细均匀,照片要求清晰,黑白反差大。彩色插图(照片)需转化为灰度图。插图(照片)要精选,切忌与表及文中表达重复。

2.5 应引用与本职工作有关的、近年的主要文献,未公开发表的资料请勿引用。引用时,参考文献序号须加[],一般置于右上角;若写成“文献[]”,则与正文平排。参考文献应按正文中引文出现的先

后顺序列出。参考文献中,作者应以姓在前、名缩写在后的形式列出(不加缩写点)。文献作者3名以内全部列出,4名以上只列前3名,后加“等”或“, et al”。英文稿件中的中文参考文献需在其后注明“(in Chinese)”。专著、期刊等文献格式按GB/T 7714-2005的规则执行,说明如下(请参考本刊网站作者须知):

✦ 专著(包括各种图书,学位论文,技术报告,文集,丛书等)

主要责任者.题名:其他题名信息[文献类型标志].其他责任者.版本项(初版不写).出版地:出版者,出版年:引用页码。

✦ 专著中的析出文献

析出文献主要责任者.析出文献题名[文献类型标志].析出文献其他责任者//主要责任者.专著题名:其他题名信息.版本项(初版不写).出版地:出版者,出版年:起始页码。

✦ 连续出版物(包括期刊,报纸等)

主要责任者.题名:其他题名信息[文献类型标志].年,卷(期)-年,卷(期).出版地:出版者,出版年:起始页码。

✦ 连续出版物(包括期刊,报红等)中的析出文献

析出文献主要责任者.析出文献题名[文献类型标志].连续出版物题名:其他题名信息,年,卷(期):起始页码。

✦ 专利文献

申请专利者或所有者.专利题名:专利国别,专利号[文献类型标识].公告日期或公开日期。

✦ 电子文献

主要责任者.题名:其他题名信息[文献类型标志/文献载体标志].出版地:出版者,出版年(更新或修改日期)[引用日期].获取或访问路径(其中文献类型标志/文献载体标志包括:[DB/OL]表示联机网上数据库,[DB/MT]表示磁带数据库,[M/CD]表示光盘图书,[CP/DK]表示磁盘软件,[J/OL]表示网上期刊,[EB/OL]表示网上电子公告)

3. 其它

3.1 作者须通过网站远程稿件处理系统投稿。拟刊登的稿件,作者需提供其最后定稿的方正或Word等电子文档;不拟刊登的来稿,编辑部将及时函告作者,但稿件不退还,请自留底稿。

3.2 稿件文责自负(包括政治、学术、保密等),编辑部有权进行技术性和文字性的修改。来稿一经排版,作者对清样稿不能再作大量的文字改动。编辑部对在本刊发表论著者,收取适量的发表费。稿件刊登后将向作者寄送本期样刊1份、精装抽印本10份,并为作者提供该文的PDF文档。

3.3 作者须同意将该文的复制权、发行权、信息网络传播权、翻译权、汇编权等权力在全世界范围内转让给编辑部。

3.4 清样稿的PDF文档将通过E-mail发给通讯作者作最后的阅读和校对。编辑部在收到校对后的清样稿和发表费后再安排付印。

3.5 凡与编辑部的通讯,请注明稿件编号。来函请寄:610065 四川省成都市四川大学收发服务中心378号信箱。

E-mail:jamp@scu.edu.cn,网址: <http://jamp.ijournals.cn>.

原子与分子物理学报

(双月刊 1984年创刊)

2024年 第41卷 第6期

Journal of Atomic and Molecular Physics

(Bimonthly, First Published in 1984)

Vol. 41 No. 6 2024

主管单位 四川省科学技术协会
主办单位 四川大学
四川省物理学会
编辑出版 《原子与分子物理学报》编辑部
(610065 成都市一环路南一段24号)
E-mail: jamp@scu.edu.cn

创刊主编 苟清泉
主编 李家明, 赵伊君, 陈向荣
印刷 成都市富生实业有限公司
国内发行 四川省报刊发行局
国内订购 全国各地邮政局
国外发行 中国国际图书贸易总公司
出版日期 2024年12月28日

Managed by Sichuan Association of Science and Technology
Sponsored by Sichuan University
Sichuan Physical Society
Edited by Editorial Office of
Journal of Atomic and Molecular Physics
<http://jamp.ijournals.cn>

Founding Editor GOU Qing-Quan
Editors LI Jia-Ming, ZHAO Yi-Jun, CHEN Xiang-Rong
Printed by Chengdu Fusheng Co., Ltd
Distributed by Chengdu Post Office in Sichuan Province
Domestic All Local Post Offices
Foreign China International Book Trading Corporation
Publishing Date Dec. 28, 2024

连续出版物号: ISSN 1000-0364
CN 51-1199/O4

国内外公开发行代号: 国内邮发 62-54
国外发行 BM5973

国内定价: 50.00元/期