

原子与分子物理学报

(Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao)

(双月刊 1984 年创刊)

2025 年 第 42 卷 第 2 期

目 次

· 原子、分子结构与光谱 ·

- 021001 煤表面含氧官能团吸附氮化物的模拟计算研究 孙潇楠, 唐 克, 王聚财, 等
- 021002 甲烷在钠基蒙脱土吸附的第一性原理研究 方志杰, 李 博, 宋昌辉, 等
- 021003 双偶氮苯 - 二苯并 [b,i] 噻蒎 - [2,3-b] 苯 - 5,7,12,14 - 四酮衍生物分子的二阶非线性光学性质
张宇红, 李 博, 陈自然, 等
- 021004 Cu 掺杂及缺陷共存对 ZnO 光催化影响的理论研究 张海峰, 赵晋忠, 伊思静, 等
- 021005 特丁基对苯二酚的密度泛函理论计算及红外光谱分析 张竺立, 逯美红, 高鹏慧, 等
- 021006 氟诺哌齐结构和性质的密度泛函理论研究 孙婷婷, 王德堂
- 021007 香榭酯分子及晶体结构、热力学和电子性质的理论研究 杜洪臣, 邝伟伟, 潘荣凯, 等
- 021008 MgN_4 掺杂石墨烯 CO 氧化催化活性的密度泛函研究 袁 利, 郑灵丹, 周慧颖, 等

· 团簇与纳米结构 ·

- 022001 基于密度泛函理论研究 Ag - Co 团簇的结构、电子和光学性能 李维银, 尚瑞咏, 王春勇, 等
- 022002 二维 TiS_2/TiO_2 杂化纳米片储钠性质的第一性原理研究 结文·乃比, 刘金宝, 郑智华, 等
- 022003 基于分子束外延技术可控制备 Bi 原子团簇的研究 马玉麟, 郭 祥, 丁 召
- 022004 锯齿形氮化铝纳米带负阻器件电子输运性质研究 黄绛雪, 黄启俊, 何 进, 等
- 022005 纳米尺度下水液滴撞击固体表面润湿性行为的分子动力学模拟 王美婷, 祁影霞, 陶 杰, 等

· 等离子体及原子分子碰撞过程 ·

- 023001 质子入射 In 靶激发 L 系特征 X 射线的角分布研究 柳 钰, 王 兴, 徐忠锋, 等

· 极端条件下的原子分子物理 ·

- 024001 高温下 HMX 热分解反应分子动力学模拟 陈 芳, 贾方硕, 陈 瑶, 等

024002 激光场中原子阈上电离的强场近似方法研究 全小刚, 薛玉峰, 张治国, 等

· 量子光学与量子信息 ·

025001 非均匀强激光场下正负电子对的产生 落彩青, 任云亮, 吾拉依木江·司提瓦力地

· 原子分子物理交叉学科 ·

026001 m-DABDT 金属有机骨架电子性质和应变调控效应的第一性原理研究 刘金宝, 结文·乃比, 崔恩豪, 等

026002 基于第一性原理 C-Cd 掺杂 ZnO 的电子结构和光学性质的研究 张善祥, 李海侠, 于镇, 等

026003 理论探索二维 X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$) 的力学特征、电子结构和声子输运特征 程钧

026004 Li 掺杂对 4H-SiC 光电性质影响的理论研究 李萍, 尹伟, 潘学聪, 等

026005 二维 Janus LuCl₂ 的铁谷特性研究 朱靖欣, 郭三栋

026006 金属卤素钙钛矿 CsPbBr₃ 的电声耦合输运特性研究 杨帆, 周贤中

026007 4d 金属掺杂 MoS₂ 改善对 NO₂ 传感性能的机理研究 潘一翠, 罗磊, 高鑫, 等

026008 Mn、Zn、Sn 掺杂 CsPbI₃ 的稳定性和光电性质研究 张仁杰, 陶红帅, 郝启圣

CONTENTS

• Atomic and Molecular Structure and Spectroscopy •

- 021001 Simulation calculation on the adsorption of nitrides by oxygen – containing functional groups on coal surface
SUN Xiao-Di, TANG Ke, WANG Ju-Cai, et al
- 021002 First-principles study on adsorption of methane on sodium montmorillonite
FANG Zhi-Jie, LI Bo, SONG Chang-Hui, et al
- 021003 Theoretical study on the second – order nonlinear optical properties of bisazo – dibenzo [b,i] thianthracene
– [2,3 – b] benzene – 5,7,12, 14 – tetrone derivative molecules. ... *ZHANG Yu-Hong, LI Bo, CHEN Zi-Ran, et al*
- 021004 Theoretical study on the effects of Cu doping and defect coexistence to ZnO photocatalysis
ZHANG Hai-Feng, ZHAO Jin-Zhong, YI Si-Jing, et al
- 021005 Density functional theory calculation and infrared spectral analysis of tert – butylhydroquinone
ZHANG Zhu-Li, LU Mei-Hong, GAO Peng-Hui, et al
- 021006 Density functional study of structure and property of fluoropezil *SUN Ting-Ting, WANG De-Tang*
- 021007 Theoretical study on the molecular and crystal structures, thermal and electronic properties of torreyagrاندate ...
DU Hong-Chen, HUAN Wei-Wei, PAN Rong-Kai, et al
- 021008 A DFT investigation on the catalytic performance of MgN₄ – doped graphene to CO oxidation
YUAN Li, ZHENG Ling-Dan, ZHOU Hui-Ying, et al

• Cluster and Nanostructure •

- 022001 Study on the structural, electronic and optical properties of the Ag – Co clusters based on density functional theory
..... *LI Wei-Yin, SHANG Rui-Yong, WANG Chun-Yong, et al*
- 022002 First-principles study on sodium storage properties of two – dimensional TiS₂/TiO₂ hybrid nanosheets
NABI Jawhar, LIU Jin-Bao, ZHENG Zhi-Hua, et al
- 022003 Research on the controllable preparation of Bi atomic clusters based on molecular beam epitaxy technology
MA Yu-Lin, GUO Xiang, DING Zhao
- 022004 Study of electronic transport properties in negative resistance devices based on zigzag aluminum nitride nanoribbons
..... *HUANG Jiang-Xue, HUANG Qi-Jun, HE Jin, et al*
- 022005 Molecular dynamics simulation on wetting behavior of water droplets hitting solid surfaces at the nanoscale
WANG Mei-Ting, QI Ying-Xia, TAO Jie, et al

• Plasmas and Atomic and Molecular Collisions •

- 023001 Study on angular distribution of L characteristic X – ray emission from In target by proton impact
LIU Yu, WANG Xing, XU Zhong-Feng, et al

· Atomic and Molecular Physics under Extreme Condition ·

- 024001 Reaction molecular dynamics simulation of thermal decomposition of HMX at high temperature
CHEN Fang, JIA Fang-Shuo, CHEN Yao, et al
- 024002 Study on the strong field approximation method for above threshold ionization of atom in laser field
TONG Xiao-Gang, XUE Yu-Feng, ZHANG Zhi-Guo, et al

· Quantum Optics and Quantum Information ·

- 025001 Pair production under inhomogeneous strong laser *LUO Cai-Qing, REN Yun-Liang, IBRAHIM Sitiwaldi*

· Interdisciplinary Subject with Atomic and Molecular Physics ·

- 026001 First-principles study on electronic properties and strain regulation effects of m – DABDT metal – organic frameworks
LIU Jin-Bao, NABI Jawhar, CUI En-Hao, et al
- 026002 Analysis of the electronic structures and optical properties of C – Cd doped ZnO based on first principles
ZHANG Shan-Xiang, LI Hai-Xia, YU Zhen, et al
- 026003 Theoretical investigation of the mechanical properties, electronic structure and phonon transport characteristics of 2D X_2UO_4 ($X = K, Rb, Cs$) *CHENG Jun*
- 026004 Theoretical study on the effect of Li doping on the photoelectric properties of 4H – SiC
LI Ping, YIN Wei, PAN Xue-Cong, et al
- 026005 The study of ferrovalley properties for two-dimensional Janus $LuCl_2$ *ZHU Jing-Xin, GUO San-Dong*
- 026006 Study on the electrophonic coupling and transport properties of metal halide perovskite $CsPbBr_3$
YANG Fan, ZHOU Xian-Zhong
- 026007 Research on mechanism of 4d metal – doped MoS_2 to improve NO_2 sensing performance
PAN Yi-Cui, LUO Lei, GAO Xin, et al
- 026008 Study on the stabilities and photoelectric properties of Mn, Zn, Sn doped $CsPbI_3$
ZHANG Ren-Jie, TAO Hong-Shuai, HAO Qi-Sheng

原子与分子物理学报

二〇二五年四月 第四十二卷 第二期

原子与分子物理学报

二〇二五年四月 第四十二卷 第二期

原子与分子物理学报

二〇二五年四月 第四十二卷 第二期

《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
耿华运 GENG Hua-Yun	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	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. 论文类别

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、名缩写在内的形式列出

(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文者,收取适量的发表费。稿件刊登后将向作者寄送本期月刊1份、精装抽印本10份,并为作者提供该文的PDF文档。

3.3 全体作者同意与编辑部签署《论文著作版权许可使用协议》,将该论文的复制权、发行权、信息网络传播权、广播权、表演权、翻译权、汇编权、改编权等著作财产权许可给本编辑部使用。

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)

2025年 第42卷 第2期

Journal of Atomic and Molecular Physics

(Bimonthly, First Published in 1984)

Vol. 42 No. 2 2025

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 2025年4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 Apr. 28, 2025

连续出版物号: ISSN 1000-0364
CN 51-1199/04

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