

# 原子与分子物理学报

( Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao )

( 双月刊 1984 年创刊 )

2026 年 第 43 卷 第 1 期

## 目 次

### · 原子、分子结构与光谱 ·

- 011001 煤分子成键特性及化学反应性研究 ..... 周俊杰, 王 娟, 汤松臻
- 011002 基于光谱学习法研究基态一氧化碳分子 1-0 带的光谱参数 ..... 徐志豪, 杨俊锋, 石晋豪, 等
- 011003 千金藤素分子结构分析及反应活性位点预测 ..... 唐海飞, 吴梅青, 陈 思
- 011004 含氢类金刚石薄膜制备研究 ..... 谭 心, 苍 磊, 李家畅, 等
- 011005 铈掺杂铝氢化钠脱氢性能的计算模拟 ..... 仝小刚, 杨淑萍
- 011006  $H_2^+$  离子激发 Si 的 K 壳层 X 射线辐射 ..... 谢树青, 尉 静, 周贤明, 等

### · 团簇与纳米结构 ·

- 012001 基于 C2DB 二维数据库的空穴掺杂可调谐磁性结构挖掘 ..... 安俊秋, 黄序轩, 王红艳, 等
- 012002 不同原子尺寸下二元 Lennard - Jones 液体微观结构的分子动力学模拟研究 ..... 张文惠, 王丽娜, 林佳玮, 等
- 012003  $BeF_3^-$  超卤离子团簇的结构及其储氢性能研究 ..... 阮 文, 伍冬兰, 勾庆东
- 012004 基于 MBE 技术进行 Ga、Bi 原子团簇共沉积制备的研究 ..... 马玉麟, 郭 祥, 丁 召
- 012005 新型超氧族原子  $Be@Sn_9$  结构和性质的理论研究 ..... 薛朵梅, 李 莹, 智丽飞, 等

### · 等离子体及原子分子碰撞过程 ·

- 013001 链间耦合对正负 trions 非弹性散射性质的影响 ..... 刘俊娟, 刘晓琳, 邱 冰

### · 极端条件下的原子分子物理 ·

- 014001 规范场下两组分玻色 - 哈伯德模型的有效自旋模型与莫特绝缘相 ..... 潘宗朕, 郑 一
- 014002 基于第一性原理研究固态一氧化碳的高压相变 ..... 赵 爽, 张泽童, 焦 振, 等

### · 量子光学与量子信息 ·

- 015001 基于量子点 - 混合腔光机械系统中光学双稳态的可控光学开关 ..... 徐名琪, 田昌海, 王 应, 等

· 原子分子物理交叉学科 ·

- 016001 原子尺度 h - BN 增强镍基涂层重复摩擦磨损机理的研究 ..... 廖 彬, 姚建忠, 王文雪, 等
- 016002 新型透明导电 SnO<sub>2</sub>:W/Ag/SnO<sub>2</sub>:W 薄膜的制备及其性能研究 ..... 苏 敏, 岳 兰, 孟繁新, 等
- 016003 模板效应下 TiC/VC 纳米多层膜界面结构的第一性原理研究 ..... 孙士阳, 钱远近, 刘 阳, 等
- 016004 基于燕麦的抗氧化活性肽的虚拟筛选研究 ..... 许丽佳, 李正文, 董宏波, 等
- 016005 基于高斯近似势的  $\kappa$  - Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 热导率张量分析 ..... 余达明, 蔡锦鸿, 周贤中
- 016006 二维 MoS<sub>2</sub> 和 MoSH 结构和电子性质的第一性原理研究 ..... 赵 爽, 鲁奕辰, 陶雅乐, 等

## CONTENTS

### • Atomic and Molecular Structure and Spectroscopy •

- 011001 Study on bonding characteristics and chemical reactivity of coal molecules .....  
*ZHOU Jun-Jie, WANG Juan, TANG Song-Zhen*
- 011002 A spectroscopy learning approach for the spectroscopic parameters in the 1–0 band of the ground electronic state  
of CO ..... *XU Zhi-Hao, YANG Jun-Feng, SHI Jin-Hao, et al*
- 011003 Molecular structure analysis and prediction of reactive sites of cepharanthine .....  
*TANG Hai-Fei, WU Mei-Qing, CHEN Si*
- 011004 Hydrogenated diamond-like carbon film preparation research ..... *TAN Xin, CANG Lei, LI Jia-Chang, et al*
- 011005 Investigate on the dehydrogenation performance of cerium-doped sodium alanate ... *TONG Xiao-Gang, YANG Shu-Ping*
- 011006 Si K-shell x-ray emission induced by  $H_2^+$  ions ..... *XIE Shu-Qing, WEI Jing, ZHOU Xian-Ming, et al*

### • Cluster and Nanostructure •

- 012001 Mining of tunable magnetic structures through hole doping based on C2DB two-dimensional database .....  
*AN Jun-Qiu, HUANG Xu-Xuan, WANG Hong-Yan, et al*
- 012002 Microstructures of binary Lennard-Jones liquids with different atomic sizes studied by molecular dynamics simulation  
..... *ZHANG Wen-Hui, WANG Li-Na, LIN Jia-Wei, et al*
- 012003 The structures and hydrogen storage properties of  $BeF_3^-$  superhalogen anion cluster .....  
*RUAN Wen, WU Dong-Lan, GOU Qing-Dong*
- 012004 Research on the co-deposition of Ga and Bi atomic clusters based on MBE technology .....  
*MA Yu-Lin, GUO Xiang, DING Zhao*
- 012005 Theoretical study on the structure and properties of a novel super-chalcogen atom  $Be@Sn_9$  .....  
*XUE Duo-Mei, LI Ying, ZHI Li-Fei, et al*

### • Plasmas and Atomic and Molecular Collisions •

- 013001 The effect of interchain coupling on inelastic scattering of oppositely charged trions .....  
*LIU Jun-Juan, LIU Xiao-Lin, DI Bing*

### • Atomic and Molecular Physics under Extreme Condition •

- 014001 The Mott insulation phase and effective spin model of the two-component Bose-Hubbard model .....  
*PAN Zong-Zhen, ZHENG Yi*

### • Quantum Optics and Quantum Information •

- 015001 A controllable optical switch based on optical bistability in a quantum dot-hybrid cavity optomechanical system  
..... *XU Ming-Qi, TIAN Chang-Hai, WANG Ying, et al*

· Interdisciplinary Subject with Atomic and Molecular Physics ·

- 016001 Study of repetitive frictional wear mechanism for atomic-scale h-BN-enhanced nickel-based coatings .....  
*HE Shi-Ying, XIE Rui-Tian, LIU Juan, et al*
- 016002 Preparation and properties of new transparent conductive SnO<sub>2</sub>:W/Ag/SnO<sub>2</sub>:W thin films .....  
*SU Min, YUE Lan, MENG Fan-Xin, et al*
- 016003 First-principles study of the interfacial structure of TiC/VC nano-multilayer films under the template effect  
..... *SUN Shi-Yang, QIAN Yuan-Jin, LIU Yang, et al*
- 016004 Study on the oat peptide inhibitor database and its virtual screening for Keap1 inhibitory activity .....  
*XU Li-Jia, LI Zheng-Wen, DONG Hong-Bo, et al*
- 016005 Thermal conductivity tensor analysis of  $\kappa$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> based on Gaussian approximation potential .....  
*YU Da-Ming, CAI Jin-Hong, ZHOU Xian-Zhong*
- 016006 First-principles study of the structural and electronic properties of two-dimensional MoS<sub>2</sub> and MoSH .....  
*ZHAO Shuang, LU Yi-Chen, TAO Ya-Le, et al*

原子与分子物理学报

二〇二六年二月 第四十三卷 第一期

原子与分子物理学报

二〇二六年二月 第四十三卷 第一期

原子与分子物理学报

二〇二六年二月 第四十三卷 第一期

# 《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)

2026年 第43卷 第1期

Journal of Atomic and Molecular Physics

(Bimonthly, First Published in 1984)

Vol. 43 No. 1 2026

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 2026年2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 Feb. 28, 2026

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