

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 1 期

目 次

· 原子、分子结构与光谱 ·

- 011001 乙酰丙酮铱 $\text{Ir}(\text{acac})_3$ 电子结构及光学性质的理论研究 樊依佳, 蔚娇娇, 郭家成, 等
- 011002 HTPB 对 PYX 耐热炸药性能微观影响的分子动力学模拟 毛舰森, 王保国, 陈亚芳, 等
- 011003 Fe、Ir 掺杂 MoS_2 表面对 N_2 气敏吸附与解离反应性能提升的第一性原理研究 肖香珍, 胡林峰, 张建伟
- 011004 噻吩酰亚胺衍生物二阶非线性光学性质的 DFT 研究 蔺彬彬, 闫慧君
- 011005 二氢杨梅素分子结构与性质的密度泛函理论研究 辛国鹏, 毛 敏, 刘信平, 等
- 011006 掺杂单层 MoS_2 电子结构与光催化性质的第一性原理计算 徐启远, 高 朋, 刘正堂
- 011007 基于结构动力学的 EGFR 罕见突变型 (S768I) 致 NSCLC 分子机制研究 王雨婷, 刘梦婷, 王妍雯, 等
- 011008 达卡巴嗪分子拉曼和紫外吸收光谱的理论研究 陈玉锋, 陈 慧, 任黎英, 等
- 011009 基于第一性原理的 Sc 掺杂 ZnO 对气体的吸附特性研究 张巍钟, 李海侠, 吴浩伟, 等

· 团簇与纳米结构 ·

- 012001 Ag^+ 、 Zn^{2+} 、 Cr^{3+} 改性 Y 型分子筛吸附脱除喹啉的模拟计算研究 孙潇楠, 唐 克, 高 畅, 等
- 012002 黑磷/黑砷异质结纳米器件热电性质应力调控研究 戎 杲, 邱乙峰, 张 蓓
- 012003 石墨烯 - 硼烯共面异质结结构和性质计算研究 刘会彬, 刘品妍, 陈思雨, 等
- 012004 Ru 团簇对 Ni/Ni₃Al 合金纳米线形变影响的原子模拟 阳喜元
- 012005 铂修饰氮化铝纳米管对 CO 的吸附性能研究 任舒宁, 何建桥, 黄海深, 等

· 等离子体及原子分子碰撞过程 ·

- 013001 等离子体改性聚酰亚胺热老化的分子模拟 丁 璨, 田浩博, 陈 琛

· 极端条件下的原子分子物理 ·

- 014001 基于锥形超晶格 p - AlInGaN 层的 AlGaIn 基深紫外发光二极管性能优化 许 愿, 张傲翔, 张鹏飞, 等

· 量子光学与量子信息 ·

015001 非厄米 PT 对称多通道光波导体系的调控及动力学 孙 武, 叶伏秋, 张光成

· 原子分子物理交叉学科 ·

016001 二维光晶格中旋转玻色-爱因斯坦凝聚基态中的涡旋分布 张志强, 王平平, 吕亚南

016002 S 空位及非金属掺杂单层 $\text{Bi}_2\text{S}_2\text{Se}$ 的第一性原理研究 张建华, 王 敏, 陈 畅, 等

016003 Ta-W/Hf 合金的结构稳定性及力学性质的第一性原理计算 周少兰, 李忠盛, 丛大龙, 等

016004 基于密度泛函理论研究 Co、Ni、As 掺杂载金黄铁矿的电子结构和稳定性 吴德宝, 唐 云, 李国辉, 等

016005 稀土元素 Er、Yb 和 Y 掺杂 ZrO_2 的第一性原理研究 熊 威, 任 浩

016006 基于第一性原理的镧掺杂氧化锌的性质研究 王馨悦, 许钟华, 吴光成, 等

016007 稀土硼酸盐双折射材料的电子结构和光学性质的第一性原理研究 努尔比耶·图尔洪, 刘鸿涛, 崔秀花, 等

016008 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 热电性能的第一性原理计算 邓南发, 周贤中

CONTENTS

· Atomic and Molecular Structure and Spectroscopy ·

- 011001 Theoretical studies of electron structures and optical properties of $\text{Ir}(\text{acac})_3$
FAN Yi-Jia, WEI Jiao-Jiao, GUO Jia-Cheng, et al
- 011002 Molecular dynamics simulation of microcosmic effect of HTPB on properties of PYX explosive
MAO Jian-Sen, WANG Bao-Guo, CHEN Ya-Fang, et al
- 011003 First-principles study on the improvement of N_2 gas sensitive adsorption and dissociation reaction performance on Fe and Ir doped MoS_2 surfaces
XIAO Xiang-Zhen, HU Lin-Feng, ZHANG Jian-Wei
- 011004 DFT study of second-order nonlinear optical properties of thiophenimide derivatives
LIN Bin-Bin, YAN Hui-Jun
- 011005 Density functional theory study on molecular structure and properties of dihydromyricetin
XIN Guo-Peng, MAO Min, LIU Xin-Ping, et al
- 011006 First-principles study on the electronic structures and photocatalytic properties of doped monolayer MoS_2
XU Qi-Yuan, GAO Peng, LIU Zheng-Tang
- 011007 Molecular mechanism of EGFR rare mutation (S768I) – induced NSCLC based on structural dynamics
WANG Yu-Ting, LIU Meng-Ting, WANG Yan-Wen, et al
- 011008 Density functional theory study on Raman and ultraviolet spectra of dacarbazine molecule
CHEN Yu-Feng, CHEN Hui, REN Li-Ying, et al
- 011009 Study on the adsorption characteristics of gas by Sc – doped ZnO based on first principles
ZHANG Wei-Zhong, LI Hai-Xia, WU Hao-Wei, et al

· Cluster and Nanostructure ·

- 012001 Study on the simulation of quinoline adsorption from model fuel on Y zeolites modified by Ag^+ , Zn^{2+} and Cr^{3+} ...
SUN Xiao-Di, TANG Ke, GAO Chang, et al
- 012002 Thermoelectric properties of black phosphorus/black arsenic heterojunction under different stress regulations
RONG Yi, QIU Yi-Feng, ZHANG Bei
- 012003 Computational investigation of structures and properties of graphene-borophene coplanar heterojunction
LIU Hui-Bin, LIU Pin-Yan, CHEN Si-Yu, et al
- 012004 Atomistic simulation about the effect of Ru cluster on the deformation of Ni/ Ni_3Al alloy nanowire
YANG Xi-Yuan
- 012005 Study on adsorption property of CO by Pt-decorated AlN nanotube
REN Shu-Ning, HE Jian-Qiao, HUANG Hai-Shen, et al

· Plasmas and Atomic and Molecular Collisions ·

- 013001 Molecular simulation of thermal aging of plasma – modified polyimide
DING Can, TIAN Hao-Bo, CHEN Chen

• Atomic and Molecular Physics under Extreme Condition •

014001 Improved performance of AlGaN – based deep – ultraviolet light – emitting diodes using tapered superlattice p – AlInGaN layer *XU Yuan, ZHANG Ao-Xiang, ZHANG Peng-Fei, et al*

• Quantum Optics and Quantum Information •

015001 Regulation and dynamics of non-Hermitian PT symmetric multi-channel optical waveguide system
SUN Wu, YE Fu-Qiu, ZHANG Guang-Cheng

• Interdisciplinary Subject with Atomic and Molecular Physics •

016001 Vortex distribution in ground state of rotating Bose-Einstein condensations in two – dimensional optical lattices
ZHANG Zhi-Qiang, WANG Ping-Ping, LÜ Ya-Nan

016002 First-principles study of S vacancy and nonmetallic doped monolayer Bi₂S₂Se
ZHANG Jian-Hua, WANG Ming, CHEN Chang, et al

016003 First-principles study of structural stability and mechanical properties of Ta-W/Hf alloys
ZHOU Shao-Lan, LI Zhong-Sheng, CONG Da-Long, et al

016004 Studies of electronic structures and stabilities of Co – , Ni – and As – doped gold – loaded pyrites from density functional theory
WU De-Bao, TANG Yun, LI Guo-Hui, et al

016005 First-principles study of zirconia doping with rare – earth elements Er, Yb and Y *XIONG Wei, REN Hao*

016006 Study on the properties of lanthanum doped zinc oxide based on first principles
WANG Xin-Yue, XU Zhong-Hua, WU Guang-Cheng, et al

016007 First-principles study of electronic structure and optical properties of rare earth borate birefringent materials
TUERHONG Nuerbiye, CUI Xiu-Hua, LIU Jing, et al

016008 First-principles calculation of the thermoelectric performance of β – Ga₂O₃ *DENG Nan-Fa, ZHOU Xian-Zhong*

原子与分子物理学报

二〇二五年二月 第四十二卷 第一期

原子与分子物理学报

二〇二五年二月 第四十二卷 第一期

原子与分子物理学报

二〇二五年二月 第四十二卷 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,可写在表底线左下方。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)

2025年 第42卷 第1期

Journal of Atomic and Molecular Physics

(Bimonthly, First Published in 1984)

Vol. 42 No. 1 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, 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