

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 4 期

目 次

· 原子、分子结构与光谱 ·

- 041001 桥连四唑阴离子与稠环阳离子含能盐结构与性能的理论研究 赵江山, 浦维威, 居学海
- 041002 Ni 掺杂氧化钨催化剂的析氧反应密度泛函研究 周俊杰, 石焯云, 赵 凯
- 041003 外电场对 C_{18} 和 B_9N_9 两种等电子体的不同效应: 分子构型和电子结构 王 川, 吴 洁, 黄沐沁
- 041004 $CaCO_3$ 分子的解离产物合成 $CaAl_2O_4$ 分子 蒋倩云, 崔金玉, 王 丽, 等
- 041005 基于 Cu 修饰的石墨二炔抗癌药物 6-巯基嘌呤纳米载体的性能研究 袁冬庆, 王允辉, 杨志红
- 041006 高温下 CL-20/RDX 混合炸药热分解机理的反应分子动力学模拟 米方琦, 陈 芳, 贾翔宇, 等
- 041007 基于密度泛函理论研究 $C_{13}H_{19}N_3O_7$ 结构与光谱性质 郭雅晶, 张永刚
- 041008 高效单原子催化剂 $TM@Nb_2CF_2$ 的第一性原理研究 严逸凡, 李秀梅, 杜俊梅, 等

· 团簇与纳米结构 ·

- 042001 CrSSe/GeC 异质结的光学性能与应变诱导类型转变研究 丁柯兵, 黄 欣, 杨志红
- 042002 原子掺杂笼状 B_{40} 团簇的几何结构和三阶非线性光学响应 钟全洁
- 042003 第一性原理对 $MgGe_n$ ($n = 2 \sim 19$) 团簇结构和性质的研究 欧满琳, 张 颂, 莫秋燕, 等
- 042004 烧结烟气粉尘云式除尘中团聚剂机理分析 姜亦康, 李海英, 徐有伟, 等

· 等离子体及原子分子碰撞过程 ·

- 043001 基于电离诱导二次谐波探测 THz 波形的轨线分析 陆俊臣, 张家宁, 唐文琦, 等

· 极端条件下的原子分子物理 ·

- 044001 利用三束激光调控谐波截止能量来产生孤立阿秒脉冲 高枫昀, 冯立强, 安蓉桦, 等
- 044002 高压下 Nb_2SnC 的结构稳定性、力学性质及最小热导率的第一性原理研究 陈 娟, 王玉宝, 李红琴

045001 四组份量子隐形传态网络的理论分析 王昱焜, 房昱同, 周瑶瑶

046001 AT 二聚体分子结基于不同连接构型热电转换性能理论研究 宋成伟, 张 蓓

046002 F 与 P 共掺杂 g - C₃N₄ 电子结构与光学性质的第一性原理研究 林必康, 谢 泉, 江橙橙, 等

046003 单晶 Fe 中空洞与析出相对裂纹扩展行为影响的分子动力学研究 卢 泽, 宋述鹏, 夏文斌, 等

046004 碳含量对 h - BCN 力学性能的影响 田兴业, 于 进

046005 单/双轴应变对二维 MoSi₂N₄ 电子结构与光学性质的影响 冼婧如, 黄煜军, 李昱霖, 等

046006 碳化物 M₆C 磁性演变机理及实验验证 杨雨豪, 侯廷平, 蒋更平, 等

CONTENTS

• Atomic and Molecular Structure and Spectroscopy •

041001	Theoretical study on structure and property of energetic salts with bridged tetrazole anion and fused–ring cation	ZHAO Jiang-Shan , PU Wei-Wei , JU Xue-Hai
041002	Density functional study of oxygen evolution reaction on Ni–doped ruthenium oxide catalysts	ZHOU Jun-Jie , SHI Zhuo-Yun , ZHAO Kai
041003	Different effects of external electric fields on C ₁₈ and B ₉ N ₉ : molecular configuration and electronic structure	WANG Chuan , WU Jie , HUANG Mu-Qin
041004	Synthesis of CaAl ₂ O ₄ from dissociated products of CaCO ₃	JIANG Qian-Yun , CUI Jin-Yu , WANG Li , et al
041005	Properties of graphdiyne anticancer drug 6–mercaptapurine nanocarriers based on Cu modification	YUAN Dong-Qing , WANG Yun-Hui , YANG Zhi-Hong
041006	Thermal decomposition mechanism of CL–20/RDX mixed explosives at high temperature by reactive molecular dynamics simulations	MI Fang-Qi , CHEN Fang , JIA Xiang-Yu , et al
041007	Density–functional theory study of the structural and spectra properties for C ₁₃ H ₁₉ N ₃ O ₇	GUO Ya-Jing , ZHANG Yong-Gang
041008	First–principles study of high–efficiency single–atom catalysts supported on TM@Nb ₂ CF ₂	YAN Yi-Fan , LI Xiu-Mei , DU Jun-Mei , et al

• Cluster and Nanostructure •

042001	Optical properties and strain–induced type transition of CrSSe/GeC heterojunction	DING Ke-Bing , HUANG Xin , YANG Zhi-Hong , et al
042002	Geometric structures and third–order nonlinear optical responses of atom–doped cage–like B ₄₀ clusters	ZHONG Quan-Jie
042003	First–principles studies on the structure and properties of MgGe _n (n = 2 ~ 19) clusters	OU Man-Lin , ZHANG Song , MO Qiu-Yan , et al
042004	Mechanism analysis of agglomerating agents in sintering flue gas dust removal by cloud–air–purifying technology	JIANG Yi-Kang , LI Hai-Ying , XU You-Wei , et al

• Plasmas and Atomic and Molecular Collisions •

043001	Trajectory analysis of THz waveforms detection based on ionisation–induced second harmonic	LU Jun-Chen , ZHANG Jia-Ning , TANG Wen-Qi , et al
--------	--	--

• Atomic and Molecular Physics under Extreme Condition •

044001	Generation of isolated attosecond pulse through controlling the harmonic cutoff using three–color laser pulses ...	GAO Feng-Yun , FENG Li-Qiang , AN Rong-Hua , et al
--------	--	--

044002 First-principles study on structure stability, mechanical properties and minimum thermal conductivity of Nb₂SnC under high pressure CHEN Juan, WANG Yu-Bao, LI Hong-Qin

• Quantum Optics and Quantum Information •

045001 Theoretical analysis of four-partite quantum teleportation networks WANG Yu-Kun, FANG Yu-Tong, ZHOU Yao-Yao

• Interdisciplinary Subject with Atomic and Molecular Physics •

046001 Theoretical study on the thermoelectric conversion performance of AT dimer molecular junctions with different connection configurations SONG Cheng-Wei, ZHANG Bei

046002 First-principles study of the electronic structure and optical properties of F and P co-doped g-C₃N₄ LIN Bi-Kang, XIE Quan, JIANG Cheng-Cheng, et al

046003 Molecular dynamics study on the influence of voids and precipitates on crack propagation behavior in single crystal Fe LU Ze, SONG Shu-Peng, XIA Wen-Bin, et al

046004 The effects of carbon content on the mechanical properties of h-BCN TIAN Xing-Ye, YU Jin

046005 Effect of uni/biaxial strain on the electronic structure and optical properties of two-dimensional MoSi₂N₄ XIAN Jing-Ru, HUANG Yu-Jun, LI Yu-Lin, et al

046006 Mechanism and experimental verification of the magnetic evolution of carbide M₆C YANG Yu-Hao, HOU Ting-Ping, JIANG Geng-Ping, 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
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本刊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 4 期

Journal of Atomic and Molecular Physics
(Bimonthly, First Published in 1984)
Vol. 43 No. 4 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 8 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 Aug. 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