

# 物 理 学 报

第 72 卷 第 24 期 2023 年 12 月 20 日

## 目 次

### 专题: 生物分子模拟中的机器学习

- 240101 生物分子模拟中的机器学习专题编者按 ..... 李文飞 王炜 周昕  
综述
- 248701 生物大分子过渡态搜索算法及其中的机器学习 ..... 杨建宇 席昆 竺立哲
- 248702 蛋白质结构模型质量评估方法综述 ..... 刘栋 崔新月 王浩东 张贵军
- 248704 蛋白质  $pK_a$  预测模型研究进展 ..... 罗方芳 蔡志涛 黄艳东
- 248708 生物分子模拟中的机器学习方法 ..... 管星悦 黄恒焱 彭华祺 刘彦航 李文飞 王炜  
研究论文
- 240501 靶向 PD-L1 蛋白的计算机辅助药物筛选 ..... 林开东 林晓倩 林绪波
- 240502 高分子塌缩相变和临界吸附相变的计算机模拟和机器学习 ..... 罗启睿 沈一凡 罗孟波
- 248703 RNA 扭转角预测的深度学习 ..... 欧秀娟 肖奕
- 248705 使用中间层受监督的自编码器探索蛋白质的构象空间 ..... 陈光临 张志勇

### 专题: 二维及拓扑自旋物理

#### 研究论文

- 247501 二维钼掺杂  $Cr_2S_3$  纳米片的生长与磁性研究 ..... 杨瑞龙 张钰樱 杨柯 姜琦涛 杨晓婷 郭金中 许小红
- 247503 二维磁性半导体笼目晶格  $Nb_3Cl_8$  单层的磁性及自旋电子输运性质 ..... 樊晓箐 李怡莲 吴怡 陈俊彩 徐国亮 安义鹏

### 总论

- 240301 实用化态制备误差容忍参考系无关量子密钥分发协议 ..... 周阳 马啸 周星宇 张春辉 王琴
- 240601 多普勒非对称空间外差仪探测高层大气风速的三种方法比较研究 ..... 李文文 惠宁菊 李存霞 刘洋河 方妍 李凌青 王彦龙 唐远河

### 原子和分子物理学

- 243101 层间共价键和拉伸应变对双层石墨烯纳米带热导率的调控 ..... 李耀隆 李哲 李松远 张任良
- 243301  $Pr^{3+}$  共掺杂调控的  $Li_{0.9}K_{0.1}NbO_3:Er^{3+}$  荧光粉上/下转换双模式光学测温研究 ..... 贾朝阳 杨雪 王志刚 柴瑞鹏 庞庆 张翔宇 高当丽

### 电磁学、光学、声学、传热学、经典力学和流体动力学

- 244201 基于 Stokes 矢量差分法的背景光偏振特性研究 ..... 徐菁焱 吴国俊 董晶 于洋 封斐 刘博
- 244202 基于 FTO/Ag/FTO 构型的高透明红外隐身薄膜设计 ..... 王龙 汪刘应 刘顾 唐修检 葛超群 王滨 许可俊 王新军
- 244203 基于平行平板电极的非球面双液体透镜的仿真与实验分析 ..... 孔梅梅 董媛 徐春生 刘悦 薛银燕 潘世成 赵瑞
- 244204 一维超导微波腔晶格中反旋波效应对拓扑相变和拓扑量子态的调制 ..... 郑智勇 陈立杰 向吕 王鹤 王一平

## 气体、等离子体和放电物理

- 245201 基于 X 射线荧光光谱的温稠密物质电子结构密度效应研究 ..... 张志宇 赵阳 青波 张继彦 马建毅 林成亮 杨国洪 韦敏习 熊刚 吕敏 黄成武 朱托 宋天明 赵妍 张玉雪 张璐 李丽灵 杜华冰 车兴森 黎宇坤 詹夏宇 杨家敏
- 245202 HL-2M 托卡马克装置中螺旋波与低杂波的协同电流驱动 ..... 刘冠男 李新霞 刘洪波 孙爱萍
- 245203 软 X 射线条纹相机 CsI 光阴极响应灵敏度的理论计算 ... 何小安 杨家敏 黎宇坤 李晋 熊刚
- 245204 (100) 间隙型位错环在纯钨及含氮杂质钨 (010) 表面下运动行为的分子动力学模拟 ..... 秦梦飞 王英敏 张红玉 孙继忠

## 凝聚物质: 结构、力学和热学性质

- 246101 液态 Ta 快凝过程中团簇的遗传及其与局域对称性的关联 ..... 文大东 祁青华 黄欣欣 易洲 邓永和 田泽安 彭平
- 246601 离散波导热扩散耦合机理及其应用 ..... 孟令知 苑立波
- 246801 基于粗粒化分子动力学的自支撑石墨烯镜面屈曲研究 ..... 续文龙 开玥 张锴 郑百林

## 凝聚物质: 电子结构、电学、磁学和光学性质

- 247101 单层  $1T\text{-CoI}_2$  中 Kitaev 作用的第一性原理研究 ..... 朱凯 黄灿 曹邦杰 潘燕飞 樊济宇 马春兰 朱岩
- 247301 非厄米 Su-Schrieffer-Heeger 链边缘态和趋肤效应依赖的电子输运特性 ... 杨艳丽 段志磊 薛海斌
- 247502 二维 kagome 晶格过渡金属酞菁基异质结的电子性质 ..... 姜舟 蒋雪 赵纪军
- 247801 幅值可控的逆反射和镜像反射双通道超表面结构拓扑优化设计 ..... 史鹏飞 马馨莹 向川 赵宏革 李渊 高仁璟 刘书田

## 物理学交叉学科及有关科学技术领域

- 248501 电化学金属化阻性存储器导电细丝生长中的离子动力学研究 ..... 柯庆 代月花
- 248502 基于各向异性及后加速技术的百飞秒时间分辨条纹管设计 ..... 田丽萍 沈令斌 陈萍 刘玉柱 陈琳 惠丹丹 陈希儒 赵卫 薛彦华 田进寿
- 248706 一种突触可塑性导致的觉醒-睡眠周期中突触强度变化和神经动力学转变 ..... 李瑞 徐邦林 周建芳 姜恩华 汪秉宏 袁五届
- 248707 基于几何相位的太赫兹编码超表面反射器研制与测试 ..... 姜在超 宫正 钟芸襄 崔彬 邹斌 杨玉平
- 248801 硒化亚锗异质结太阳能电池模拟研究 ..... 肖友鹏 王怀平 冯林
- 248802 聚合物内封装层辅助空气中钙钛矿模组器件制备及其光电特性 ..... 徐洁 冯泽华 刘冰野 朱欣怡 代锦飞 董化 吴朝新

## 更正

- 249901 更正: 锁相放大器的研究进展 [物理学报 2023, 72(22): 224206] ..... 郭忠凯 李永刚 于博丞 周世超 孟庆宇 陆鑫鑫 黄一帆 刘贵鹏 陆俊

(卷终)

文章图片的彩色效果详见网刊



扫码阅读  
电子版

# ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 72, No. 24, December 20, 2023

## CONTENTS

### SPECIAL TOPIC—Machine learning in biomolecular simulations

- 240101 Preface to the special topic: Machine learning in biomolecular simulations  
*Li Wen-Fei Wang Wei Zhou Xin*

#### REVIEW

- 248701 Transition state searching for complex biomolecules: Algorithms and machine learning  
*Yang Jian-Yu Xi Kun Zhu Li-Zhe*
- 248702 Recent advances in estimating protein structure model accuracy  
*Liu Dong Cui Xin-Yue Wang Hao-Dong Zhang Gui-Jun*
- 248704 Progress in protein  $pK_a$  prediction  
*Luo Fang-Fang Cai Zhi-Tao Huang Yan-Dong*
- 248708 Machine learning in molecular simulations of biomolecules  
*Guan Xing-Yue Huang Heng-Yan Peng Hua-Qi Liu Yan-Hang Li Wen-Fei Wang Wei*

#### ARTICLE

- 240501 Virtual screening of drugs targeting PD-L1 protein  
*Lin Kai-Dong Lin Xiao-Qian Lin Xu-Bo*
- 240502 Computer simulation and machine learning of polymer collapse and critical adsorption phase transitions  
*Luo Qi-Rui Shen Yi-Fan Luo Meng-Bo*
- 248703 Deep learning methods of predicting RNA torsion angle  
*Ou Xiu-Juan Xiao Yi*
- 248705 Exploring protein's conformational space by using encoding layer supervised auto-encoder  
*Chen Guang-Lin Zhang Zhi-Yong*

### SPECIAL TOPIC—Two-dimensional magnetism and topological spin physics

#### ARTICLE

- 247501 Growth and magnetic properties of two-dimensional vanadium-doped  $\text{Cr}_2\text{S}_3$  nanosheets  
*Yang Rui-Long Zhang Yu-Ying Yang Ke Jiang Qi-Tao Yang Xiao-Ting Guo Jin-Zhong Xu Xiao-Hong*
- 247503 Magnetism and spin transport properties of two-dimensional magnetic semiconductor kagome lattice  $\text{Nb}_3\text{Cl}_8$  monolayer  
*Fan Xiao-Zheng Li Yi-Lian Wu Yi Chen Jun-Cai Xu Guo-Liang An Yi-Peng*

#### GENERAL

- 240301 Study of practical state-preparation error tolerant reference-frame-independent quantum key distribution protocol  
*Zhou Yang Ma Xiao Zhou Xing-Yu Zhang Chun-Hui Wang Qin*
- 240601 A comparative study of three methods to detect the upper atmospheric wind speed by DASH  
*Li Wen-Wen Hui Ning-Ju Li Cun-Xia Liu Yang-He Fang Yan Li Ling-Qing Wang Yan-Long Tang Yuan-He*

(Continued)

## ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS

- 243101 Regulation of thermal conductivity of bilayer graphene nanoribbon through interlayer covalent bond and tensile strain  
*Li Yao-Long Li Zhe Li Song-Yuan Zhang Ren-Liang*
- 243301 Dual-mode up/down-conversion optical thermometry of Pr<sup>3+</sup>-regulated Li<sub>0.9</sub>K<sub>0.1</sub>NbO<sub>3</sub>:Er<sup>3+</sup> phosphors  
*Jia Chao-Yang Yang Xue Wang Zhi-Gang Chai Rui-Peng Pang Qing Zhang Xiang-Yu Gao Dang-Li*

## ELECTROMAGNETISM, OPTICS, ACOUSTICS, HEAT TRANSFER, CLASSICAL MECHANICS, AND FLUID DYNAMICS

- 244201 Research on polarization characteristics of background light by modified polarization difference imaging method  
*Xu Jing-Han Wu Guo-Jun Dong Jing Yu Yang Feng Fei Liu Bo*
- 244202 Design of high transparent infrared stealth thin films based on FTO/Ag/FTO structure  
*Wang Long Wang Liu-Ying Liu Gu Tang Xiu-Jian Ge Chao-Qun Wang Bin Xu Ke-Jun Wang Xin-Jun*
- 244203 Simulation and experimental analysis of aspherical double-liquid lens based on parallel plate electrode  
*Kong Mei-Mei Dong Yuan Xu Chun-Sheng Liu Yue Xue Yin-Yan Pan Shi-Cheng Zhao Rui*
- 244204 Modulation of topological phase transitions and topological quantum states by counter-rotating wave effect in one-dimensional superconducting microwave cavity lattice  
*Zheng Zhi-Yong Chen Li-Jie Xiang Lü Wang He Wang Yi-Ping*

## PHYSICS OF GASES, PLASMAS, AND ELECTRIC DISCHARGES

- 245201 Density effect on electronic structure of warm dense matter based on X-ray fluorescence spectroscopy  
*Zhang Zhi-Yu Zhao Yang Qing Bo Zhang Ji-Yan Ma Jian-Yi Lin Cheng-Liang Yang Guo-Hong Wei Min-Xi Xiong Gang Lü Min Huang Cheng-Wu Zhu Tuo Song Tian-Ming Zhao Yan Zhang Yu-Xue Zhang Lu Li Li-Ling Du Hua-Bing Che Xing-Sen Li Yu-Kun Zhan Xia-Yu Yang Jia-Min*
- 245202 Synergistic current drive of helicon wave and lower hybrid wave in HL-2M  
*Liu Guan-Nan LI Xin-Xia Liu Hong-Bo Sun Ai-Ping*
- 245203 Theoretical calculation of response sensitivity of CsI photocathode of soft X-ray streak camera  
*He Xiao-An Yang Jia-Min Li Yu-Kun Li Jin Xiong Gang*
- 245204 Molecular dynamics simulation of dynamic migration of <100> interstitial dislocation loops under (010) surfaces of pure W and W containing helium impurity  
*Qin Meng-Fei Wang Ying-Min Zhang Hong-Yu Sun Ji-Zhong*

## CONDENSED MATTER: STRUCTURAL, MECHANICAL, AND THERMAL PROPERTIES

- 246101 Heredity of clusters in liquid Ta rapid solidification process and its correlation with local symmetry  
*Wen Da-Dong Qi Qing-Hua Huang Xin-Xin Yi Zhou Deng Yong-He Tian Ze-An Peng Ping*
- 246601 Thermal diffusion coupling mechanism and its application of discrete waveguide  
*Meng Ling-Zhi Yuan Li-Bo*
- 246801 Mirror buckling analysis of freestanding graphene membranes by coarse-grained molecular dynamics method  
*Xu Wen-Long Kai Yue Zhang Kai Zheng Bai-Lin*

(Continued)

## CONDENSED MATTER: ELECTRONIC STRUCTURE, ELECTRICAL, MAGNETIC, AND OPTICAL PROPERTIES

- 247101 First-principles study of role of Kitaev interaction in monolayer  $1T\text{-CoI}_2$   
*Zhu Kai Huang Can Cao Bang-Jie Pan Yan-Fei Fan Ji-Yu Ma Chun-Lan Zhu Yan*
- 247301 Edge states and skin effect dependent electron transport properties of non-Hermitian Su-Schrieffer-Heeger chain  
*Yang Yan-Li Duan Zhi-Lei Xue Hai-Bin*
- 247502 Electronic properties of two-dimensional kagome lattice based on transition metal phthalocyanine heterojunctions  
*Jiang Zhou Jiang Xue Zhao Ji-Jun*
- 247801 Topology optimization design of dual-channel metasurface structure with controllable amplitude of retroreflection and mirror reflection  
*Shi Peng-Fei Ma Xin-Ying Xiang Chuan Zhao Hong-Ge Li Yuan Gao Ren-Jing Liu Shu-Tian*

## INTERDISCIPLINARY PHYSICS AND RELATED AREAS OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

- 248501 Kinetics study of ions in conductive filament growth process of electrochemical metallization resistive memory  
*Ke Qing Dai Yue-Hua*
- 248502 100-fs time-resolved streak tube design based on anisotropy and post-acceleration technology  
*Tian Li-Ping Shen Ling-Bin Chen Ping Liu Yu-Zhu Chen Lin Hui Dan-Dan Chen Xi-Ru Zhao Wei Xue Yan-Hua Tian Jin-Shou*
- 248706 A synaptic plasticity induced change in synaptic intensity variation and neurodynamic transition during awakening-sleep cycle  
*Li Rui Xu Bang-Lin Zhou Jian-Fang Jiang En-Hua Wang Bing-Hong Yuan Wu-Jie*
- 248707 Encoding terahertz metasurface reflectors based on geometrical phase modulation  
*Jiang Zai-Chao Gong Zheng Zhong Yun-Xiang Cui Bin Zou Bin Yang Yu-Ping*
- 248801 Numerical simulation of germanium selenide heterojunction solar cell  
*Xiao You-Peng Wang Huai-Ping Feng Lin*
- 248802 Preparation and optoelectronic characteristics of perovskite module devices in air assisted by polymer inner packaging layern  
*Xu Jie Feng Ze-Hua Liu Bing-Ye Zhu Xin-Yi Dai Jin-Fei Dong Hua Wu Zhao-Xin*

## ERRATA

- 249901 Erratum: Research progress of lock-in amplifiers [Acta Phys. Sin. 2023, 72(22): 224206]  
*Guo Zhong-Kai Li Yong-Gang Yu Bo-Cheng Zhou Shi-Chao Meng Qing-Yu Lu Xin-Xin Huang Yi-Fan Liu Gui-Peng Lu Jun*

(END OF THE VOLUME)

Color figures can be viewed in the online issue.



Online issue