

ISSN 0253-9950

CN 11-2045/TL



QK2310581

HEHUAXUE YU FANGSHE HUAXUE

核化学与放射化学

5

第45卷

2023

JOURNAL OF NUCLEAR AND RADIOCHEMISTRY

“放射性核素理论与计算化学”青年专辑

执行编委：胡淑贤

Md

Cm

Lr

No

Ac

Fm

Pa

Np

Th

Pu

ISSN 0253-9950



9 770253 995231

10>

中国核学会核化学与放射化学分会 主办
中国核工业集团有限公司 主管

核化学与放射化学

刊名题字 杨承宗

第 45 卷 第 5 期

2023 年 10 月

目 次

“放射性核素理论与计算化学”青年专辑

序言	胡淑贤
铀酰大环配体化合物的理论研究进展	王 聪, 王 凯, 胡淑贤(377)
铀氧化层结构的理论研究进展	谢刘桦, 邱睿智(389)
超铀元素化合物共价性的理论研究进展	刘 阳, 王聪芝, 吴王锁, 石伟群(397)
镅的化学氧化及电化学氧化研究进展	蒋 慧, 颜 欣, 刘子义, 王东琪(408)
熔融盐结构的研究进展	李泽浩, 赵学文, 吴 非(423)
铀、钷族金属氮化碳配合物结构、成键和还原性质的密度泛函理论研究	安 然, 孔 明, 胡万权, 倪义东, 沈永鹏, 李淑君, 郭元茹, 潘清江(436)
不同来源腐殖酸与 U(VI) 结合特性差异的实验与分子动力学模拟	赵煜帆, 吴 鹏, 尹霄羽, 李飞泽, 廖家莉, 杨远友, 刘 宁, 兰 图(444)
深度学习引导的高通量分子筛选用于铈的选择性配位	张智渊, 董 越, 邱雨晴, 毕可鑫, 胡孔球, 戴一阳, 周 利, 刘 冲, 吉 旭, 石伟群(456)
铀酰叠氮离子化合物的质谱分析与理论计算	洪 静, 韩昌财, 费泽杰, 唐圆圆, 刘艳成, 周露露, 刘洪涛, 熊孝根, 董常武(466)

期刊基本参数: CN 11-2045/TL * 1979 * b * A4 * 100 * zh * P * ¥15.00 * 800 * 09 * 2023-10

本期执行编委: 胡淑贤

本期责任编辑: 张小庆 陈春雪

《核化学与放射化学》第九届编辑委员会

(以姓氏笔画为序)

顾 问	王方定	朱永贻	刘元方	沈文庆	张焕乔	赵宇亮	柴之芳	傅依备	
主 编	沈兴海								
副 主 编	龙兴贵	吴王锁	张生栋	张华北	陈 靖				
委 员	丁戈龙	丁有钱	于俊峰	王 驹	王旻凹	王东琪	王和义	王建晨	王荣福
	王祥科	韦悦周	石伟群	龙兴贵	叶国安	田国新	田嘉禾	史克亮	冯孝贵
	师全林	向学琴	刘 宁	刘广山	刘云海	刘志超	刘志博	刘春立	那 平
	孙涛祥	杜 进	杜金洲	李 隽	李金英	李泽军	李首建	李晴暖	杨 兴
	杨宇川	杨楚汀	肖成建	吴王锁	吴国忠	何 辉	汪小琳	沈兴海	张 岚
	张生栋	张华北	张安运	张俊波	张振涛	张智勇	陆跃翔	陈 凌	陈 靖
	陈懋文	罗志福	郑卫芳	郑成斌	赵永刚	秦 芝	党海军	晏太红	徐 超
	郭治军	黄 超	黄闻亮	龚 昱	常志远	崔大庆	崔孟超	矫彩山	彭述明
	谢 翔	褚明福	褚泰伟	翟茂林					
编 辑	张小庆	陈春雪							

CONTENTS

Youth Column of Radionuclide Theory and Computational Chemistry

- Preface HU Shu-xian
- Theoretical Studies on Uranyl Macrocyclic Ligand Complexes WANG Cong, WANG Kai, HU Shu-xian(377)
- Progress in Theoretical Investigation on Oxide Layer Structure Over Metallic Plutonium
..... XIE Liu-hua, QIU Rui-zhi(389)
- Recent Theoretical Advances in Bond Covalency of Transplutonium Compounds
..... LIU Yang, WANG Cong-zhi, WU Wang-suo, SHI Wei-qun(397)
- Advances in Chemical and Electrochemical Oxidation of Americium
..... JIANG Hui, YAN Xin, LIU Zi-yi, WANG Dong-qi(408)
- Research Progress in Structure of Molten Salts LI Ze-hao, ZHAO Xue-wen, WU Fei(423)
- Density Functional Theory Study of Structure, Bonding and Redox Property of Uranium and Scandium-Group Complexes
Supported by Graphitic Carbon Nitride AN Ran,
KONG Ming, HU Wan-quan, NI Yi-dong, SHEN Yong-peng, LI Shu-jun, GUO Yuan-ru, PAN Qing-jiang(436)
- Experiments and Molecular Dynamics Simulations on Nature Differences of Humic Acids From Different Origin for
Binding Characteristics of U(VI)
ZHAO Yu-fan, WU Peng, YIN Xiao-yu, LI Fei-ze, LIAO Jia-li, YANG Yuan-you, LIU Ning, LAN Tu(444)
- Deep Learning-Guided High-Throughput Evaluation of Ligands for Selective Sr/Cs Coordination ... ZHANG Zhi-yuan,
DONG Yue, QIU Yu-qing, BI Ke-xin, HU Kong-qiu, DAI Yi-yang, ZHOU Li, LIU Chong, JI Xu, SHI Wei-qun(456)
- Mass Spectrum and Theoretical Calculation for Azide Radical Complexes With Uranyl(V) Cation $[\text{UO}_2(\text{N}_3)_n]^-$ ($n=1-4$) ...
..... HONG Jing, HAN Chang-cai, FEI Ze-jie,
TANG Yuan-yuan, LIU Yan-cheng, ZHOU Lu-lu, LIU Hong-tao, XIONG Xiao-gen, DONG Chang-wu(466)

投稿须知

1 投稿方式

实行网上注册投稿、网上回执和网上送审。请登录我刊网站(www.jnrc.org.cn)至《核化学与放射化学》窗口,点击“作者登录”,进入注册后完成投稿流程。投稿成功后,我刊会及时收稿、编号,及时发邮件回执。来稿须附有作者单位(学术委员会或业务部门)对文稿内容的学术性、真实性、作者署名是否正确以及内容是否涉及保密问题的审查证明(可在本刊网站下载中心下载),编辑部方才进行送审。有关稿件的审理进展情况,您可凭用户名和密码登录“作者中心”的下拉框“在线查稿”了解审稿进展和审稿意见。如投稿成功3个工作日后未收到投稿回执的,请及时发邮件查询(E-mail: hehuaxue8025@163.com),以免遗漏。

2 投稿要求

- (1) 文稿务必做到清稿定稿。稿件要求论点明确,数据可靠,文字简练,条理清楚。
- (2) 来稿引用他人研究成果时,请按《著作权法》有关规定在参考文献中写明,否则由此引起的责任由投稿人自负。
- (3) 收稿后4个月内编辑部将通知作者是否录用(特别约定者除外),作者在收到修改意见单后,6个月内必须将原稿、修改稿、意见单寄回编辑部。超过时间,作自动退稿处理。
- (4) 文稿中,外文字母必须分清大、小写;上、下角的字母、数码和符号等位置的高低,应区别明显。
- (5) 来稿要求文题简明(20字以内),须有中文摘要(含研究目的、方法、结果和结论)和与之对照的英文摘要。英文摘要中须写明题名、作者姓名(汉语拼音)、作者单位(英文)、地址及邮编。
- (6) 来稿需提供3~5个关键词并注明图书分类号(按中国图书资料法分类)。在第一页的页下注中注明第一作者的个人信息,包括作者姓名(出生年—)、性别(民族,汉族可省略)、籍贯(省、市、县)、职称或学位、专业,并注明部级以上的基金项目名称和编号。
- (7) 文中图表只选最必要的。表格请采用三线表;图中文字符号必须清晰并与正文一致,对图的补充说明尽量以图注表示。照片务必黑白分明、层次清晰。文中所有表题、图题、表注、图注及图表中的内容均须中、英文对照。
- (8) 一律采用法定计量单位。物理量以量符号表示,量符号与单位间用“/”隔开。
- (9) 参考文献格式请按本刊要求著录(格式另刊)。
- (10) 来稿不许一稿两投。不拟刊登的稿件,恕不退还原稿。来稿一经发表,将按规定支付稿酬。本刊已入编《中国学术期刊(光盘版)、网络版》、《中文科技期刊数据库》、《中国期刊全文数据库》(CJFD)、《中国科技期刊精品数据库》、《中国学术期刊综合评价数据库》(CAJCED)、《中国生物医学文献数据库》、超星移动“域出版”平台和入网“万方数据——数字化期刊群”,并已加入DOAJ数据库,所付稿酬包括上述服务,凡不同意纳入者请事先声明。

核化学与放射化学

(双月刊 1979年创刊)

第45卷第5期(总第204期)2023年10月

JOURNAL OF NUCLEAR AND RADIOCHEMISTRY

(Bimonthly Started in 1979)

Vol. 45 No. 5 Oct. 2023

主管:中国核工业集团有限公司

主办:中国核学会核化学与放射化学分会

出版:《核化学与放射化学》编辑部

中国原子能科学研究院

北京275信箱65分箱,邮编:102413

电话:(010)69358025

E-mail: hehuaxue8025@163.com

网址:www.jnrc.org.cn

主编:沈兴海

印刷:北京圣美印刷有限责任公司

国内发行:北京市报刊发行局

国内订购:全国各地邮局

邮发代号:82-162

国外发行与订购:中国国际图书贸易总公司

(北京市399信箱,邮政编码:100044)

邮发代号:Q 200

Responsible Institution: China National Nuclear Corporation

Sponsored by: Society of Nuclear and Radiochemistry

Published by: Editorial Board of Journal of Nuclear and Radiochemistry

China Institute of Atomic Energy

P. O. Box 275(65), Beijing 102413, China

Tel: (8610)69358025

E-mail: hehuaxue8025@163.com

Website: www.jnrc.org.cn

Editor-in-Chief: SHEN Xing-hai

Printed by: Printed by Beijing Shengmei Printing Co., Ltd.

Distributed by: Beijing Bureau for Distribution of Newspaper and Journals

Subscription Handled by: Local Post Offices of China

Postal Issue No. 82-162

Distributed Abroad by: China International Book Trading Corporation

(P. O. Box 399, Beijing 100044, China)

Postal Issue No. Q 200

中国标准连续出版物号:ISSN 0253-9950
CN 11-2045/TL

2023年10月20日出版 定价:每期15.00元,全年90.00元