



ISSN QK2253086  
CN 22-1262/O4

- ◆ 中文核心期刊
- ◆ 中国科技核心期刊
- ◆ 科技期刊世界影响力指数报告来源期刊

# 分子科学学报

## Journal of Molecular Science



第39卷 第1期  
Vol. 39 No. 1  
2023年2月

主办单位：中国化学会  
编辑出版：东北师范大学

## 目 次

### 综合评述

普鲁士蓝及其类似物作为钠离子电池正极材料的研究进展

..... 李 林,朱登贵,孙淑敏,王培远(1)

氧化还原媒介体分子调控锂-硫电池硫正极性能研究进展

..... 颜雪冬,王树增,张树国,杜晨树,罗金宝(11)

### 研究论文

钕/镍双金属光氧化还原催化 C—P 键交叉偶联反应机理的理论研究

..... 李梦杰,王 爽,关 威(20)

浸泡消毒对蔬菜中 5-甲基四氢叶酸结构影响的理论研究

..... 郝梦雪,刘永东,钟儒刚(28)

基于 Cu<sub>2</sub>S 电阻开关器件的光电记忆效应

..... 陈建彪,张 凯,杨春艳,郭童童,高丽焯,徐讲文,黄春连(35)

石墨烯负载的 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 模型催化剂的制备以及费-托合成性能研究

..... 艾心燕,吕 帅,刘成超,张煜华,王 立,李金林(42)

Mn-PNP 催化碳酸亚乙酯氢化制甲醇的机理研究

..... 李婧婧,阳 园,王金昭(49)

杂原子掺杂的素馨烯与 Li<sup>+</sup>@C<sub>60</sub> 之间弱相互作用的理论研究

..... 王鑫慧,赵子龙,金铭仪,孙 刚,杨博婷(60)

基于二酮基吡咯并吡咯的  $\pi$ -共轭分子的有机太阳能电池给体材料的设计与理论研究

..... 姜晓玲,孙福玉(68)

微流控技术制备磁性聚合物微球及对孔雀石绿的吸附性能研究

..... 陈宇溪,王艳娇,朱自豪,吕 策,周新宇,刘 岩,沈启慧(78)

基于 1,8-萘酰二胺的具有近红外吸收的  $\pi$ -共轭有机太阳能电池给体材料的分子设计

..... 崔克宇,孙 涛,石静敏,王 良(87)

期刊基本参数:CN22-1262/O4 \* 1981 \* b \* A4 \* 94 \* zh \* P \* ¥20.00 \* 1000 \* 11 \* 2023-02

## CONTENTS

### Reviews

- Research progress of prussian blue and its analogues as cathode materials for sodium ion batteries  
..... LI Lin, ZHU Deng-gui, SUN Shu-min, WANG Pei-yuan(1)
- Research progress in sulfur-based cathode modulated by redox mediators in lithium-sulfur batteries  
..... YAN Xue-dong, WANG Shu-zeng, ZHANG Shu-guo, DU Chen-shu, LUO Jin-bao(11)

### Full Papers

- Theoretical mechanistic study of Ru<sup>II</sup>/Ni<sup>0</sup>-metallaphotoredox catalyzed C—P cross-coupling reaction  
..... LI Meng-jie, WANG Shuang, GUAN Wei(20)
- Theoretical investigation of the effect of immersion disinfection on the structure of 5-methyltetrahydrofo-  
late in vegetables  
..... HUAN Meng-xue, LIU Yong-dong, ZHONG Ru-gang(28)
- Photoelectric memory effect in Cu<sub>2</sub>S based resistance switching devices  
..... CHEN Jian-biao, ZHANG Kai, YANG Chun-yan, GUO Tong-tong, GAO Li-ye, XU Jiang-wen, HUANG Chun-lian(35)
- Preparation of graphene-supported Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> model catalysts for Fischer-Tropsch synthesis  
..... AI Xin-yan, LYU Shuai, LIU Cheng-chao, ZHANG Yu-hua, WANG Li, LI Jin-lin(42)
- Study on the mechanism for the hydrogenation of ethylene carbonate to methanol catalyzed by a Mn-PNP  
pincer complex  
..... LI Jing-jing, YANG Yuan, WANG Jin-zhao(49)
- Theoretical study of the weak interaction between heteroatom-doped sumanene and Li<sup>+</sup>@C<sub>60</sub>  
..... WANG Xin-hui, ZHAO Zi-long, JIN Ming-yi, SUN Gang, YANG Bo-ting(60)
- Design and theoretical characterisation of diketopyrrolopyrrole-based  $\pi$ -conjugated molecules as donor ma-  
terials for organic solar cells  
..... JIANG Xiao-ling, SUN Fu-yu(68)
- Preparation of magnetic polymer microspheres by microfluidic technology and their adsorption properties  
for malachite green  
..... CHEN Yu-xi, WANG Yan-jiao, ZHU Zi-hao, LYU Mo, ZHOU Xin-yu, LIU Yan, SHEN Qi-hui(78)
- Molecular design of  $\pi$ -conjugated organic materials with near-infrared absorption based on 1,8-naphthalim-  
ide for applications in organic solar cells  
..... CUI Ke-yu, SUN Tao, SHI Jing-min, WANG Liang(87)

# 《分子科学学报》编辑委员会

创刊人:唐敖庆 孙家钟

名誉顾问:黎乐民 李前树 R. Hoffmann M. Karplus

主编:方维海

执行主编:张景萍

副主编:付宏刚 朱广山 苏忠民 杨柏 张前 徐海阳 逯乐慧

委员:(以姓氏笔画为序)

丁益宏 马列 马晶 王洪福 王哲明 王耀 毛宗万  
邓德会 白俊峰 邢巍 刘心元 刘宝红 刘俊 刘雷  
刘新风 许林 李兴伟 杨英威 杨国昱 肖丰收 宋秋玲  
张立军 张红星 张俊虎 张铁锐 姜雪峰 耿延侯 徐静娟  
栾新军 唐金魁 黄岩谊 梁万珍 梁高林 蒋兴宇 蒋健晖  
程方益 黎书华

海外编委:王植源(加拿大) 任彤(美国) 郑冲(美国) 郭鸿(美国)

编辑部主任:常鹰飞

分子科学学报  
FENZI KEXUE XUEBAO  
(双月刊, 1981年创刊)  
第39卷第1期总第189期  
2023年2月出版

JOURNAL OF MOLECULAR  
SCIENCE  
(Bimonthly, First Issue in 1981)  
Vol.39 No.1 Sum No.189  
February, 2023

主管单位 中国科学技术协会  
主办单位 中国化学会  
主编 方维海  
出版 《分子科学学报》编辑部  
(长春市人民大街5268号 邮编 130024)  
国内发行 中国邮政集团有限公司吉林省报  
刊发行分公司  
国外总发行 中国国际图书贸易集团有限公司  
(北京399信箱)  
网址 <http://fzkb.cbpt.cnki.net>  
电子信箱 [fzxb@vip.163.com](mailto:fzxb@vip.163.com)  
电话 0431-85099521  
订购处 全国各地邮局  
印刷 吉林省文林印务有限公司

Competent Authority China Association  
for Science and Technology  
Sponsor Chinese Chemical Society  
Chief Editor FANG Wei-hai  
Publisher Editorial Department of  
Journal of Molecular Science  
(5268 Renmin Street,  
Changchun 130024, China)  
Website <http://fzkb.cbpt.cnki.net>  
E-mail [fzxb@vip.163.com](mailto:fzxb@vip.163.com)  
Tel. 0431-85099521  
Overseas Distributor China International  
Book Trading Corporation  
(P.O.Box 399, Beijing)

中国标准连续出版物号: ISSN 1000-9035  
CN 22-1262/O4

邮发代号: 国内 12-82  
国外 BM1523

ISSN 1000-9035



9 771000 903233

国内订价: 20.00元