



ISSN Q K 2 2 5 3 0 8 6

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	邰梦雪,刘永东,钟儒刚(28)
基于 Cu ₂ 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,高丽烨,徐讲文,黄春连(35)
石墨烯负载的 Fe ₃ O ₄ 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 ⁺ @C ₆₀ 之间弱相互作用的理论研究	王鑫慧,赵子龙,金洺仪,孙 刚,杨博婷(60)
基于二酮基吡咯并吡咯的 π -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-萘酐二胺的具有近红外吸收的 π -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)

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^{II}/Ni⁰-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 Cu₂S 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 Fe₃O₄ 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⁺@C₆₀
..... WANG Xin-hui, ZHAO Zi-long, JIN Ming-yi, SUN Gang, YANG Bo-ting(60)

Design and theoretical characterisation of diketopyrrolopyrrole-based π-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 π-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
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
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