

批准立项年份	2011
通过验收年份	2015

教育部重点实验室年度报告

(2018年1月——2018年12月)

实验室名称：环境理论化学教育部重点实验室

实验室主任：顾凤龙

实验室联系人/联系电话：陈艳/020-39310552

E-mail 地址：gu@scnu.edu.cn, 20131169@m.scnu.edu.cn

依托单位名称：华南师范大学

依托单位联系人/联系电话：陈世文/020-85217435

2019年6月10日填报

填写说明

一、年度报告中各项指标只统计当年产生的数据，起止时间为1月1日至12月31日。年度报告的表格行数可据实调整，不设附件，请做好相关成果支撑材料的存档工作。年度报告经依托高校考核通过后，于次年3月31日前在实验室网站公开。

二、“**研究水平与贡献**”栏中，各项统计数据均为本年度由实验室人员在本实验室完成的重大科研成果，以及通过国内外合作研究取得的重要成果。其中：

1.“**论文与专著**”栏中，成果署名须有实验室。专著指正式出版的学术著作，不包括译著、论文集等。未正式发表的论文、专著不得统计。

2.“**奖励**”栏中，取奖项排名最靠前的实验室人员，按照其排名计算系数。系数计算方式为： $1/\text{实验室最靠前人员排名}$ 。例如：在某奖项的获奖人员中，排名最靠前的实验室人员为第一完成人，则系数为1；若排名最靠前的为第二完成人，则系数为 $1/2=0.5$ 。实验室在年度内获某项奖励多次的，系数累加计算。部委（省）级奖指部委（省）级对应国家科学技术奖相应系列奖。一个成果若获两级奖励，填报最高级者。未正式批准的奖励不统计。

3.“**承担任务研究经费**”指本年度内实验室实际到账的研究经费、运行补助费和设备更新费。

4.“**发明专利与成果转化**”栏中，某些行业批准的具有知识产权意义的国家级证书（如：新医药、新农药、新软件证书等）视同发明专利填报。国内外同内容专利不得重复统计。

5.“**标准与规范**”指参与制定国家标准、行业/地方标准的数量。

三、“**研究队伍建设**”栏中：

1.除特别说明统计年度数据外，均统计相关类型人员总数。固定人员指高等学校聘用的聘期2年以上的全职人员；流动人员指访问学者、博士后研究人员等。

2.“**40岁以下**”是指截至当年年底，不超过40周岁。

3.“**科技人才**”和“**国际学术机构任职**”栏，只统计固定人员。

4.“**国际学术机构任职**”指在国际学术组织和学术刊物任职情况。

四、“**开放与运行管理**”栏中：

1.“**承办学术会议**”包括国际学术会议和国内学术会议。其中，国内学术会议是指由主管部门或全国性一级学会批准的学术会议。

2.“**国际合作项目**”包括实验室承担的自然科学基金委、科技部、外专局等部门主管的国际科技合作项目，参与的国际重大科技合作计划/工程（如：ITER、CERN等）项目研究，以及双方单位之间正式签订协议书的国际合作项目。

一、简表

实验室名称		环境理论化学教育部重点实验室				
研究方向 (据实增删)		研究方向 1	环境污染物迁移转化的理论化学研究			
		研究方向 2	环境功能材料的分子设计与开发			
		研究方向 3	环境污染模拟与预测			
实验室主任	姓名	顾凤龙	研究方向	理论化学		
	出生日期	1967 年 1 月	职称	教授	任职时间	2012
实验室副主任 (据实增删)	姓名	江峰	研究方向	水及大气污染治理技术		
	出生日期	1980 年 1 月	职称	教授	任职时间	2015
	姓名	应光国	研究方向	环境化学与生态毒理学		
	出生日期	1964 年 12 月	职称	教授	任职时间	2016
学术委员会主任	姓名	吴云东	研究方向	理论与计算有机化学的研究		
	出生日期	1957 年 5 月	职称	教授	任职时间	2015
研究水平与贡献	论文与专著	发表论文	SCI	92 篇	EI	87 篇
		科技专著	国内出版	1 部	国外出版	部
	奖励	国家自然科学奖	一等奖	项	二等奖	项
		国家技术发明奖	一等奖	项	二等奖	项
		国家科学技术进步奖	一等奖	项	二等奖	项
		省、部级科技奖励	一等奖	0.33 项	二等奖	项
	项目到账总经费	2027.1 万元	纵向经费	1775.3 万元	横向经费	251.8 万元
	发明专利与成果转化	发明专利	申请数	53 项	授权数	44 项
		成果转化	转化数	项	转化总经费	万元
	标准与规范	国家标准		项	行业/地方标准	项

研究队伍建设	科技人才	实验室固定人员		72人	实验室流动人员		27人
		院士		0人	千人计划		0长期人 0短期人
		长江学者		0特聘人 0讲座人	国家杰出青年基金		2人
		青年长江		0人	国家优秀青年基金		2人
		青年千人计划		1人	其他国家、省部级人才计划		17人
		自然科学基金委创新群体		0人	国家自然科学基金委创新群体		0个
	国际学术机构任职 (据实增删)	姓名		任职机构或组织			职务
		顾凤龙		Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering			编辑
		应光国		Environmental Science: Processes & Impact Environmental Toxicology and Chemistry			编委 编委
		黄明智		Advances in Polymer Technology Journal of Hydrology Austin Journal of Environmental Toxicology International Journal of Digital Electronics			编委 编委 编委 编委
		江峰		国际水协会 IWA 中国青年委员会 国际水协会第9届排水过程与管网国际学术会议 (丹麦) 科学程序委员会			委员 委员
		陈长二		Journal of Environment and Health Science International Journal of Environmental Chemistry			编委 编委
		李晓敏		Journal of Life and Environmental Sciences			编委
		孙丰强		Journal of Nanomaterials			编委
李金天		Journal of Applied Ecology PLoS One Scientific Reports			编委 编委 编委		
谢凌天		Ecotoxicology Environmental Toxicology and Chemistry Chemosphere			副主编 编委 编委		
访问学者	国内		6人	国外		0人	
博士后	本年度进站博士后		10人	本年度出站博士后		4人	
学科发展与人才培养	依托学科 (据实增删)	学科 1	化学	学科 2	环境科学	学科 3	材料学
	研究生培养	在读博士生		12人	在读硕士生		116人
	承担本科课程	1580学时			承担研究生课程		480学时
	大专院校教材	部					
开放与	承办学术会议	国际	1次	国内 (含港澳台)	1次		

运行管理	年度新增国际合作项目		项	
	实验室面积	4100 M ²	实验室网址	http://sce.scnu.edu.cn/tce/
	主管部门年度经费投入	(直属高校不填)200 万元	依托单位年度经费投入	550 万元

二、研究水平与贡献

1、主要研究成果与贡献

结合研究方向，简要概述本年度实验室取得的重要研究成果与进展，包括论文和专著、标准和规范、发明专利、仪器研发方法创新、政策咨询、基础性工作等。总结实验室对国家战略需求、地方经济社会发展、行业产业科技创新的贡献，以及产生的社会影响和效益。

2018 年实验室的研究工作还是围绕着实验室三个大的研究方向开展，每个方向都有了新的突破和进展。

一、环境污染物迁移转化的理论化学研究

2018 主要开展如下几个方面的研究：

1. 污染物的高级氧化处理技术

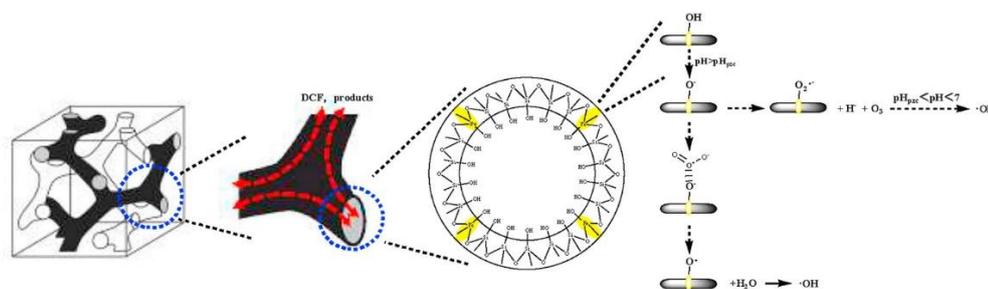
主要进行了以下两方面的工作：

1) 过硫酸盐联合光催化高效降解全氟辛酸的研究

全氟辛酸是近些年环境中出现的新型污染物，具有较高的稳定性，常规的处理工艺（如物理、化学及生物）很难将其去除。该方向使用过硫酸盐联合光催化技术促进高级氧化过程来降解全氟辛酸。该工艺对全氟辛酸具有较好的降解效果，反应 3 h 后全氟辛酸的脱氟率超过 90%。2) Fe(Cu)掺杂-MCM-48 催化臭氧氧化降解双氯芬酸。

2) Fe、Cu 改性 MCM-48 催化臭氧氧化降解 PPCPs 的研究

MCM-48 是一种具有规整结构的介孔分子筛，它本身不具有催化活性。课题组使用 Fe 或 Cu 取代 MCM-48 结构中的 Si，造成分子筛结构的晶格缺陷，从而提高催化活性，同时也能提高催化剂的稳定性。该催化剂使用 MCM-48 为载体，大幅提高了催化剂与污染物之间的传质效率；将 Fe 或 Cu 嵌入 MCM-48 的骨架当中，较好地解决了活性组分的溶出问题。Fe 或 Cu 改性 MCM-48 催化臭氧氧化双氯芬酸等 PPCPs 时，表现出较好的催化活性。



这部分工作发表在 *Chemosphere* 206(2018)615-621。

2. 光化学反应理论模拟

环境化学中存在大量的光化学反应，该类过程经常涉及电子激发态的动力学，以及核和电子的耦合运动，无法使用常用的分子模拟软件理解该类问题，是理论化学研究领域的重要挑战之一。

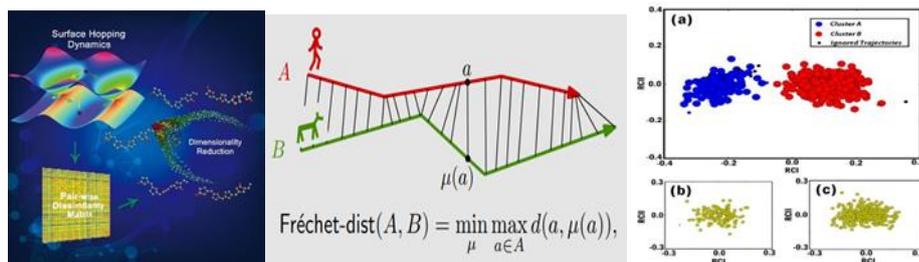
1) 光诱导激发态动力学模拟理论和方法的发展。

本课题组致力于发展动力学的模拟方法，将半经典面跳跃方法和量化计算结合，在直接动力学框架下，发展了完整的程序包，在全原子尺度上，实现了对实际多原子分子体系激发态动力学的模拟。在此基础上，研究各类光化学反应问题，特别是环境中污染物的光反应问题。

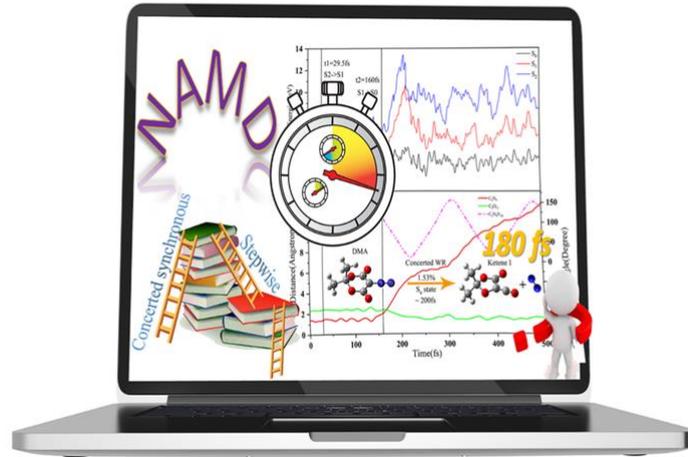


2) 机器学习与动力学

尝试将机器学习领域中的各种算法，引入到动力学模拟的理论研究，试图在该领域引入新的研究思路。如将有监督学习用于势能的构建，在保证精度的情况下，大大减少了动力学模拟的计算量。使得在全原子水平上，利用大量轨线来模拟复杂分子体系的非绝热动力学变得可能。此外，也针对动力学模拟会产生大量数据的特点，结合无监督学习的各种手段（降维、分类等），发展了有效的分析算法，用于理解动力学模拟产生的大量数据。通过机器学习的方式，自动寻找对反应过程起主导作用的运动模式。该方法能智能寻找环境科学中光反应关键运动模式，化繁为简的理解复杂问题。



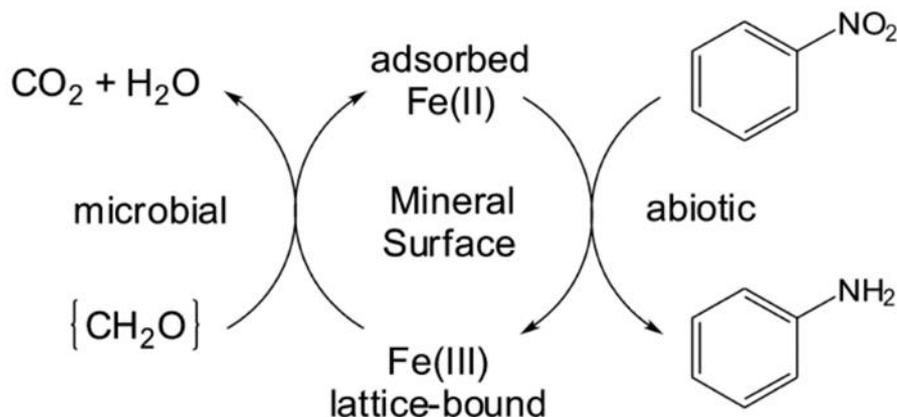
这些工作为理解环境中污染物的光化学反应过程，预测其毒理学效应提



本模拟定量地证实了通过 $(S1/S0)_x$ 的交叉缝在 $S1(S0)$ 态下经由卡宾 I 形成乙烯酮 I 的分步沃尔夫重排反应主要发生在 $C2N9$ 键长大于 (短于) 1.7 \AA 处。与此同时, 本模拟指出通过分步反应形成基态乙烯酮 I 的时间常数约为 $500/120$ 飞秒, 协同的沃尔夫重排反应时间常数约为 $180/80$ 飞秒。目前的从头算直接动力学模拟阐明了沃尔夫重排光诱导初级产物的反应机制, 交叉缝 $(S1/S0)_x$ 的势能面拓扑结构是沃尔夫重排反应不同光产物分支比的关键原因。这部分工作在同样已在《Phys.Chem.Chem.Phys.》杂志上刊登。

3. 矿物表面催化 Fe^{2+} 对污染物的还原转化与迁移调控污染物的还原转化处理技术做了以下几个方面的研究:

- 1) 铁柱撑蒙脱石(Fe-Mnt)催化 $Fe(II)$ 高效还原去除邻硝基苯酚
- 2) 钛柱撑蒙脱石(TPMnt)催化 $Fe(II)$ 高效还原去除邻硝基苯酚
- 3) 硫化物修饰纳米零价铁还原五氯苯酚

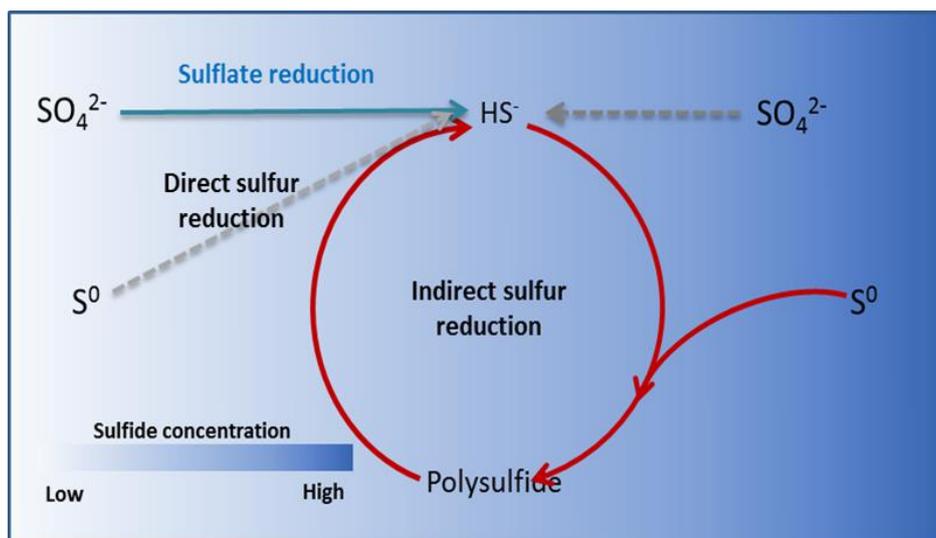


这种方法可以降低 Fe^{2+} 的氧化还原电位, 可以提高对污染物的还原转换,

控制污染物迁移行为，同时 Fe^{2+} 对微生物的循环再生，可以实现构筑一个有效的净化系统。

4. 污水处理中的硫循环

发现高浓度 SO_4^{2-} 条件 S^0 生物还原呈现竞争优势。利用该机制，实现了：快速厌氧污水处理；产生 S^{2-} 用于高效、低成本的重金属去除；污水与燃煤烟气协同处理。



以上研究成果发表在：

Environ. Sci. Technol. 52(2018)4746-4753

Environ. Sci. Technol. 52(2018)4754-4762

Water res. 130(2018)161-167

Water Res. 131(2018)239-245

Chem. Eng. J. 331(2018)16-22

Chem. Eng. J. 342(2018)438-445

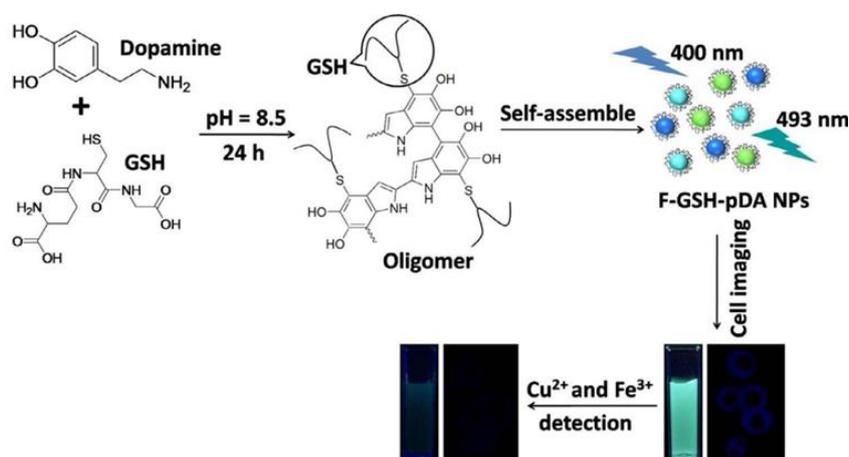
二、环境功能材料的分子设计与开发

在环境功能材料的分子设计与开发方向上，我们主要做了荧光探针分子合成与性能的研究，主要在以下三个方面开展：

1. GSH-整合的多巴胺纳米粒(F-GSH-PDA NPs)

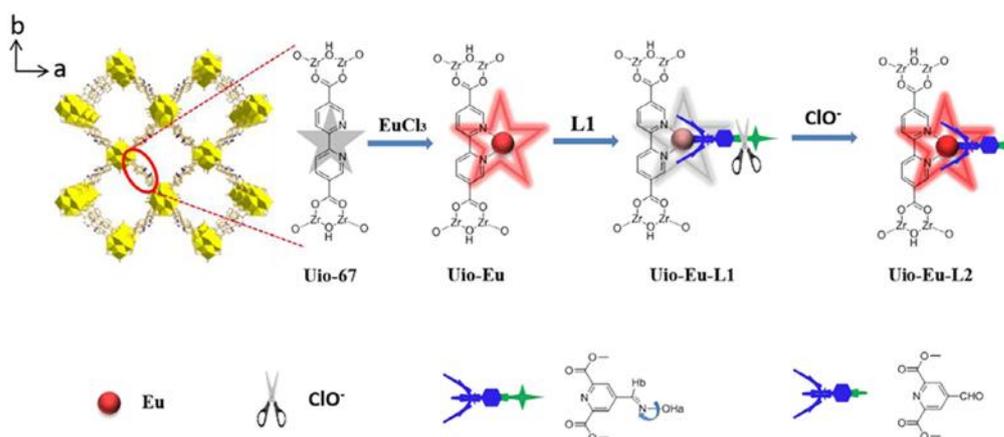
我们以自然界贻贝仿生共沉积现象为先导，基于多巴胺在室温条件下组装出纳米尺度的探针体系，首次采用谷胱甘肽对多巴胺的氧化聚合进行控制，尺度稳定在 3nm 左右。在结构表征上通过核磁氢谱及紫外吸收证实了合成过程遵从迈克尔加成机理。系统性考察了 pH 依存性，首次发现并分析了在酸性条

件的波谱移动及在碱性条件下的保持稳定的行为。研制出通过聚多巴胺量子点荧光信号变化来表达被测物成分的新技术。在配位化学基础上开发了铜铁离子作用的新模式，得到了一类能在水、缓冲溶液及细胞层面能检测铜铁离子的纳米荧光探针。



2. 新型荧光稀土有机骨架

为了精准监测和控制环境中次氯酸根离子的含量，研究工作建立在金属有机框架化合物基础上构筑了稀土镱离子发光的配位体系。通过含碳-氮双键配体的引入，调制了稀土荧光从开到关的变化。同时次氯酸根的存在迅速将双键氧化成醛基，再次实现了光学信号的恢复，检测限低至 16nM。研究在检测机理上采用核磁氢谱证实了从肟到醛的变化，并基于稳态荧光和时间分辨两种方式完成了靶向识别。



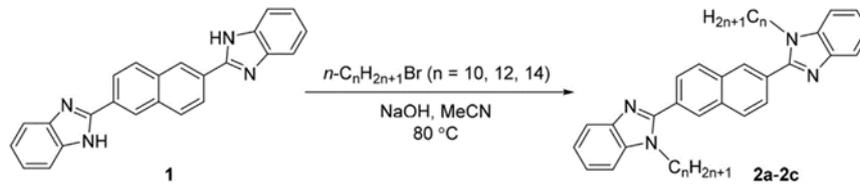
Scheme 1. Schematic illustration of Uio-Eu-L1 based fluorescence probe for detection of ClO⁻.

3. 新型苯并咪唑型酸性 pH 荧光探针

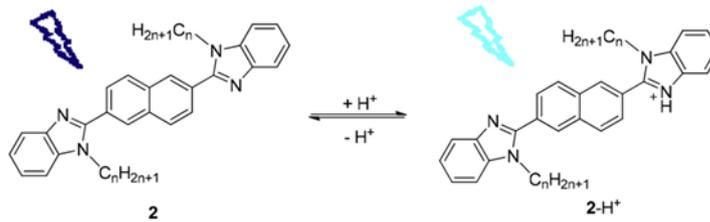
通过简单的 N-烷基化反应合成了基于萘-苯并咪唑基的酸性 pH 探针，由图 a 的紫外滴定实验可知，H⁺与探针分子存在相互作用。



在荧光滴定实验中发现随着 pH 值下降，荧光信号成比率型变化；可裸眼识别溶液荧光颜色的变化。此外，金属离子对该响应几乎无干扰。我们提出了可能的检测机理： H^+ 与苯并咪唑环中的 $C=N$ 形成氢键，从而引起光学信号变化。



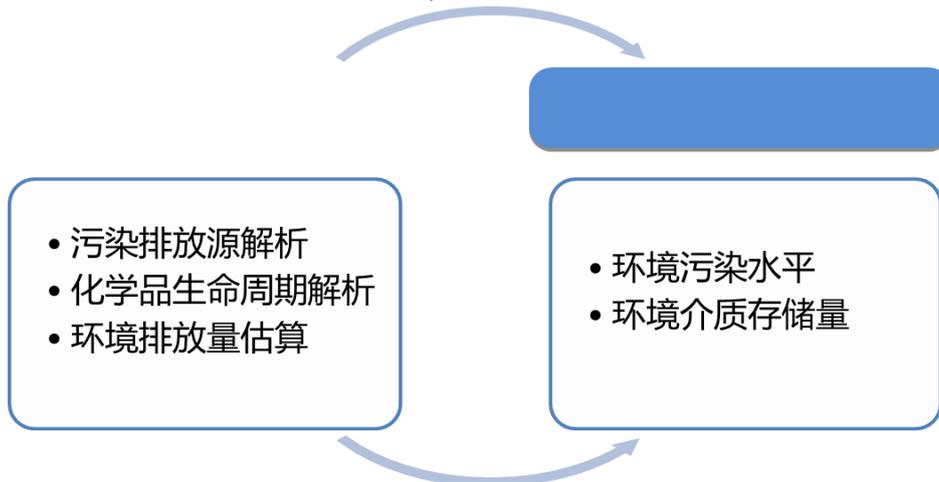
Scheme 1. Synthesis of probes 2.



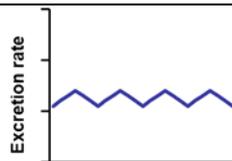
该部分成果详见 Dyes and Pigments 49(2018)1-7。

三、环境污染模拟与预测

在环境污染模拟与预测方向上，我们开展了流域化学品归趋模拟。



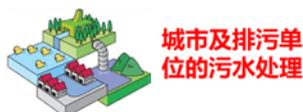
- 污染排放源解析
- 化学品生命周期解析
- 环境排放量估算



药代动力学模拟



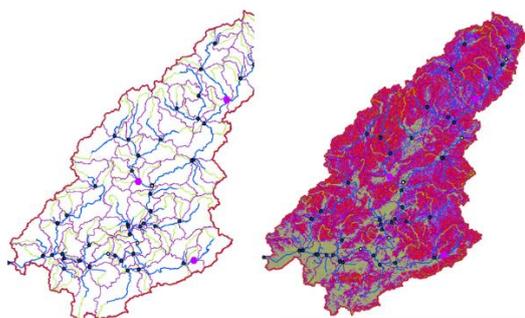
管网转化率模拟



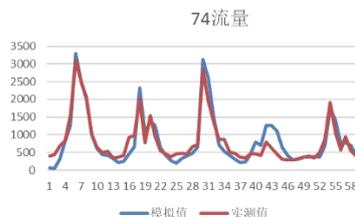
污水处理模拟

(1) 东江流域农药 SWAT 模型

我国是世界上农药使用量最大的国家，农药经使用后大量进入环境。然而，由于我国农药的使用和排放管理尚待完善，大量农药的排放水平和环境归趋有待研究。本研究以中国南方重要饮用水源东江流域为例，模拟了该区域三种典型农药（毒死蜱、三唑磷、稻瘟灵）的源汇过程。



东江流域水系提取 东江HRU划分与数据输入
后最终图



研究期间流量和泥沙率定
后模拟结果

我们首先建立了东江各子流域农药排放量估算方法。然后将使用情况输入到分布式水文模型 SWAT (土壤和水评估工具) 中，模拟目标污染物从农田排放到河流的过程，以及它们进入河网后的迁移扩散等过程。基于东江 4 个水文监测站连续 10 年的水文和泥沙观测资料，本研究对 SWAT 模型进行令人满意的率定和验证。此外，研究对东江流域水文模拟期间的农药环境水平进行了监测。模拟结果显示，东江流域目标农药的模拟和观测浓度之间的差异几乎在一个数量级内，包括超过 52% 的差异在 0.5 个数量级内。根据排放量方法和 SWAT 模型，在向流域作物喷洒毒死蜱 78860 公斤、三唑磷 54990 公斤和稻瘟灵 35320 公斤后，通过降雨、地表径流和渗滤，向环境水体排放量分别为 8489 公斤、47691 公斤和 17748 公斤。经过一系列的环境过程，包括通道内的沉降和降解，毒死蜱、三唑磷和稻瘟灵的输出质量分别降至 6552 千克、45348 千克和 16551 千克。这些农药最终会进入我国南海。本研究发现，高精度的源排放和模型输入使农药浓度预测更接近监测水平。研究首次提出的估算方法对农药源汇过程分析以及农药的环境管理具有重要的的指导意见。

(2) 生态风险评估

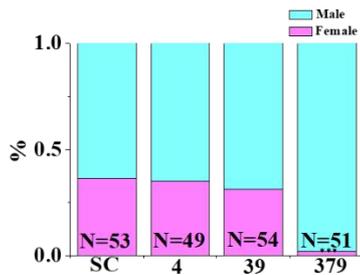
在生态毒理学方面,针对水环境中化学物质的生物可利用性、毒性风险评估与不同暴露途径关系的研究。研究集中探讨了环境污染物(金属及新型有机环境污染物等)在水生生物体内累积、随食物链转移、不同生物学水平上的毒性效应及机制。阐明了水环境中多种金属在水生生物体内的毒性效应之间的关系,探讨了影响水体中污染物生物可利用性的多因子效应,创建了在多种暴露以及摄食途径下重金属生物可利用性与毒性效应的评价方案,运用毒代动力学等手段确认了水体环境中多种污染物生态毒理作用的主要暴露途径以及系统发生学毒性推导评价体系。2018年12篇研究成果发表于 *Environ. Sci. Technol.*、*Aquat. Toxicol.*、*Sci. Total. Environ.*、*Chemosphere*、*Ecotox. Environ. Safe.* 等期刊。研究进展如下几个方面:

PPCPs 类物质对水生生物的生物效应研究进展

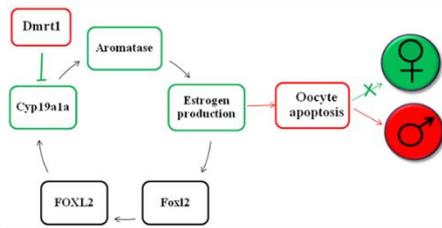
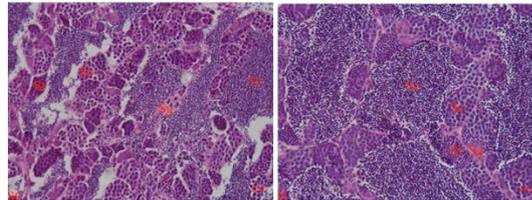
① 利用水生无脊椎动物大型蚤对 PPCPs 类物质的敏感性,探讨了大型蚤对 BPA/LD-BPA 的单独和复合暴露效应差异及机制。研究表明,虽然 LD-BPA 是潜在的绿色化合物,生产过程中可以减少次级废物的产生,但是其本身具有较低的溶解性和较高的分子量。经使用和排放到水体后,对无脊椎动物如大型蚤等滤食性生物存在更大的生物风险,其生态毒性风险分析可扩展至其它多种水生生物,以更全面评估该种物质的生态风险。② 利用本地物种麦穗鱼的生态毒理分析,探讨了抗抑郁药品氟西汀环境释放的生态风险。研究表明,氟西汀对麦穗鱼的神经系统存在潜在威胁,虽然长期暴露后有一定的适应作用,但是在暴露初期即可导致麦穗鱼脑部乙酰胆碱酯酶活性急剧升高,并造成 P450 酶系的合成紊乱,消化酶活等受到抑制作用。③ 利用进化生物学方法,探讨了不同绿藻种属间对 PPCPs 类物质(三氯生、氟西汀)的单独和复合暴露的敏感性差异及机制。研究发现,在 4 个属之间,7 种绿藻对复合暴露的响应不同,(加和作用或拮抗作用),此外,三氯生对绿藻的毒性略大于氟西汀。绿藻对三氯生的物种差异较大,因此,不同绿藻适合于特异性污染物如三氯生的监测。

孕/雌激素类物质对水生生物的生物效应研究进展

利用质谱、激素生物体测试和激素效应导向分析等方法,研究了生态水产养殖系统各个环境介质雌激素/孕激素的污染特征和鱼体生物效应;从种群、形态和组织水平等终点,研究激素类物质对受试鱼体的内分泌干扰效应;利用转录组学、实时荧光定量 PCR 等技术,筛选特异性靶基因水平,阐明激素类物质对鱼体的内分泌干扰效应分子通路。研究表明,① 斑马鱼在受到去氢孕酮长期暴露后,导致其性别比例显著偏移,并且加速精子成熟,激素调节通路响应分子通路受到胁迫,表达紊乱;并出现凋亡坏死、甲状腺传导途径干扰等症状,造成明显的生态暴露风险,威胁水生生物物种稳定性。② 食蚊鱼在受到甲基炔诺酮的长期暴露后,导致其第二性征表型发生较大变化,造成雌鱼雄性化,改变其正常的繁殖生理、病理和行为学特征,使得特定水体环境中鱼体性别比例失调,繁殖特征消失,可导致鱼体在受到该种污染物暴露后种群参数的变异。



去氢孕酮 (DDG) 诱导斑马鱼雄性化和加速雄鱼精子成熟



溶剂控制组

379 ng L⁻¹暴露组

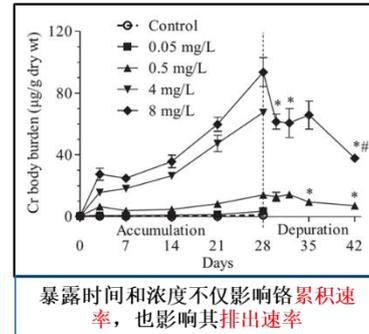
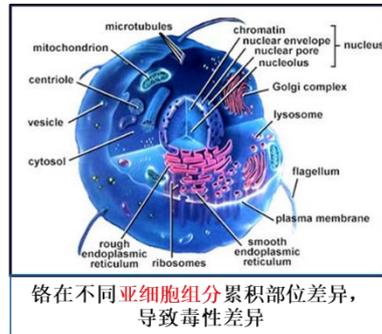
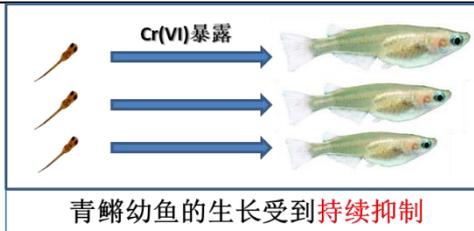
DDG促进 $dmrt1$ 转录表达, 抑制 $cyp19a1a$ 转录表达, 导致雌激素生物合成减少, 活化凋亡通路, 从而引起卵细胞凋亡。

DDG诱导斑马鱼雄性化机制

有毒和有益无机元素对水生生物的生物效应研究进展

利用模式鱼类(斑马鱼和青鳉鱼)和本地物种(麦穗鱼)为研究对象,在长期暴露条件下,全面测定了环境相关浓度饵料中铬(Cr)、硒(Se)在鱼体不同组织累积参数,分析了不同元素在组织的分别和亚细胞分布规律;探讨了鱼体多种营养物质及其响应基因、代谢产物、转录水平等的变化,确定了这些元素对鱼类的生物效应与分子机制。研究表明,①硒在鱼体的累积主要通过食物相(饵料)途径,其中硒在青鳉鱼和麦穗鱼体内均表现出了较强的饵料蓄积性,通过饵料摄入后,可快速转移到各个组织器官中。特别是有机硒,在鱼体摄入后,可在肝脏组织中转化为各种硒蛋白,并通过血液途径转运到二级器官,发挥重要的生物学作用。但是,研究发现硒具有潜在的母体传递风险,在母体蓄积和转化后,较易通过繁殖过程,威胁胚胎子代等敏感发育过程,因此,其在水产中的合理应用应该得到更多的重视。②Cr在鱼体的摄入主要通过水体途径,因此,其饵料途径摄入的风险较小。但是重金属Cr在青鳉幼鱼体内的蓄积动力学研究发现,Cr在鱼体的累积和排出均受到暴露浓度和时间的影 响。其中,累积和排出表现出较强的浓度相关性,这可能是由于其在鱼体累积后,亚细胞分布有明显的不同,暗示重金属在鱼体细胞累积后可能存在不同的库,可通过“快速”和“慢速”途径依次从组织中排出。

重金属铬在青鲮鱼体内毒性机制



综上, 围绕多种化学物质对水生生物的深入研究, 研究结果为水生生态系统的保护、水产品的食品安全及水质标准完善提供重要的理论基础; 为生态水产养殖过程中生态与人体健康风险评价提供科学依据; 并为水产品饵料投喂的科学和合理使用提供重要参考。

2、承担科研任务

概述实验室本年度科研任务总体情况。

目前实验室共主持承担了包括国家自然科学基金项目重点项目、国家重点研发项目、NSFC-广东联合重点基金子项目、国家重大专项、面上项目、青年基金项目、省部委级重大、重点等项目、市级项目和各类横向课题 133 项。其中, 主持(或承担)国家自然科学基金重点项目 1 项、国家重点研发计划课题子课题 3 项, NSFC-广东联合重点基金子项目 2 项, 国家重大科技专项子课题 1 项; 主持面上项目 16 项、国家青年科学基金项目 15 项。

请选择本年度内主要重点任务填写以下信息:

序号	项目/课题名称	编号	负责人	起止时间	经费(万元)	类别
1	基于非正交定域分子轨道的线性标度含时密度泛函理论和计算程序	2017YFB0203403	顾凤龙	2017.7-2021.6	134	国家重点研发计划课题
2	太滬运河农业复合污染控制与清洁流域技术集成与应用	2017ZX07202-004	李来胜	2017.1-2020.6	160	国家重大科技专项
3	基于硫协同电子传递理论的污水处理	E080402	江峰*	2016.1-2021.12	116	国家自然科学基金重点

	新方法及新工艺					项目
4	基于水生动物毒性的场地土壤污染评估方法研究	2018YFC1801200	谢凌天	2018.12-2022.11	76	国家重点研发计划课题
5	南流江流域印染产业集聚地废水处理与资源化关键技术	2018AB36018	杨滨	2018.3-2021.12	185	广西重点研发项目

注：请依次以国家重大科技专项、“973”计划（973）、“863”计划（863）、国家自然科学基金（面上、重点和重大、创新研究群体计划、杰出青年基金、重大科研计划）、国家科技（攻关）、国防重大、国际合作、省部重大科技计划、重大横向合作等为序填写，并在类别栏中注明。只统计项目/课题负责人是实验室人员的任务信息。只填写所牵头负责的项目或课题。若该项目或课题为某项目的子课题或子任务，请在名称后加*号标注。

三、研究队伍建设

1、各研究方向及研究队伍

研究方向	学术带头人	主要骨干
1 环境污染物迁移转化的理论化学研究	杨伟涛、束文胜、兰峥岗	李来胜、李国良、彭导灵、朱超原、徐超
2 环境功能材料的分子设计与开发	许旋、孙丰强	蔡跃鹏、汪朝阳、汤又文、王前明
3 环境污染模拟与预测	顾凤龙、应光国	江峰、杨滨、陈长二、兰峥岗、肖信

2.本年度固定人员情况

序号	姓名	类型	性别	学位	职称	年龄	在实验室工作年限
1	顾凤龙	研究人员、管理人员	男	博士	教授	51	2011.11-
2	应光国	研究人员、管理人员	男	博士	教授	55	2016.11-
3	江峰	研究人员、管理人员	男	博士	教授	38	2011.11-
4	李京波	研究人员	男	博士	教授	48	2018.12-
5	蔡跃鹏	研究人员	男	博士	教授	53	2011.11-
6	束文圣	研究人员	男	博士	教授	51	2018.1-
7	李金天	研究人员	男	博士	教授	40	2018.1-
8	黄明智	研究人员	男	博士	教授	38	2017.11-
9	李来胜	研究人员	男	博士	教授	54	2011.11-
10	潘淦	研究人员	男	博士	高级工程师；副教授	53	2018.1-
11	李爱菊	研究人员	女	博士	教授	42	2011.11-
12	李国良	研究人员	男	博士	教授	47	2011.11-

序号	姓名	类型	性别	学位	职称	年龄	在实验室工作年限
13	李红	研究人员	女	博士	教授	49	2011.11-
14	方战强	研究人员	男	博士	教授	41	2011.11-
15	罗琼	研究人员	女	博士	教授	38	2011.11-
16	罗一帆	研究人员	男	博士	教授	53	2011.11-
17	南俊民	研究人员	男	博士	教授	48	2011.11-
18	舒月红	研究人员	女	博士	教授	46	2011.11-
19	汪朝阳	研究人员	男	博士	教授	48	2011.11-
20	吴宏海	研究人员	男	博士	教授	53	2011.11-
21	许旋	研究人员	女	博士	教授	54	2011.11-
22	杨定乔	研究人员	男	博士	教授	60	2011.11-
23	曾丽璇	研究人员	女	博士	教授	46	2011.11-
24	肖信	研究人员、技术人员	男	博士	教授	41	2011.11-
25	张延霖	研究人员	男	博士	教授	42	2011.11-
26	左晓希	研究人员	女	博士	教授	41	2011.11-
27	孙丰强	研究人员	男	博士	研究员	44	2011.11-
28	兰峥岗	研究人员	男	博士	研究员	42	2018.9-
29	陈社军	研究人员	男	博士	研究员	43	2018.10-
30	谢凌天	研究人员	男	博士	研究员	50	2018.1-
31	李进开	研究人员	男	博士	研究员	35	2018.1-
32	李晓敏	研究人员	女	博士	研究员	37	2017.12-
33	彭导灵	研究人员、技术人员	男	博士	研究员	39	2013.9-
34	陈长二	研究人员	男	博士	研究员	36	2017.11-
35	王前明	研究人员	男	博士	研究员	39	2011.11-
36	刘鸿	研究人员	男	博士	研究员	34	2018.12-
37	晏波	研究人员	男	博士	研究员	39	2018.1-
38	杨滨	研究人员技术人员	男	博士	研究员	35	2016.11-
39	赵建亮	研究人员	男	博士	研究员	40	2018.1-
40	邓达义	研究人员	男	博士	副教授	39	2014.1-
41	林晓明	研究人员	男	博士	副教授	35	2015.9-
42	刘聪	研究人员	女	博士	副教授	36	2018.1-
43	吕向红	研究人员	男	博士	副教授	53	2011.11-

序号	姓名	类型	性别	学位	职称	年龄	在实验室工作年限
44	马国正	研究人员	男	博士	副教授	39	2011.11-
45	马立军	研究人员	男	博士	副教授	36	2016.1-
46	彭彬	研究人员、技术人员	男	博士	副教授	48	2011.11-
47	王朝阳	研究人员、技术人员	男	博士	副教授	54	2011.11-
48	王千金	研究人员	男	博士	副教授	53	2011.11-
49	徐志广	研究人员	男	博士	副教授	41	2011.11-
50	张立国	研究人员	男	博士	副教授	39	2011.11-
51	康园	研究人员	男	博士	副教授	34	2014.1-
52	郑刘春	研究人员	男	博士	副教授	37	2014.1-
53	黄国勇	研究人员	男	博士	副研究员	42	2018.1-
54	刘有胜	研究人员	男	博士	副研究员	38	2018.1-
55	谢宇	研究人员	男	博士	副研究员	36	2018.11-
56	许炳佳	研究人员	男	博士	副研究员	32	2016.9-
57	张芊芊	研究人员	女	博士	副研究员	32	2018.1-
58	石义静	研究人员	女	博士	副研究员	33	2017.12-
59	陈红星	研究人员	男	博士	助理研究员	32	2017.10-
60	陈涛	研究人员	男	博士	助理研究员	34	2018.1-
61	何良英	研究人员	女	博士	助理研究员	33	2018.7-
62	张秋云	研究人员	女	硕士	高级工程师	56	2011.11-
63	刘佩红	研究人员	女	本科	高级实验师	45	2011.11-
64	郑玉惠	研究人员	女	硕士	高级实验师	40	2018.1-
65	罗继文	研究人员	男	博士	讲师	39	2014.1-
66	彭亮	研究人员、技术人员	男	博士	讲师	37	2011.11-
67	王玉海	研究人员	男	博士	讲师	38	2018.1-
68	陈新丽	研究人员、技术人员	女	博士	实验师	39	2018.1-
69	陈艳	技术人员、管理人员	女	硕士	实验师	37	2011.11-
70	李旭凯	技术人员	男	博士	实验师	35	2015.1-

注：（1）固定人员包括研究人员、技术人员、管理人员三种类型，应为所在高等学校聘用的聘期2年以上的全职人员。（2）“在实验室工作年限”栏中填写实验室工作的聘期。

3、本年度流动人员情况

序号	姓名	类型	性别	年龄	职称	国别	工作单位	在实验室工作期限
1	董任峰	博士后	男	32	无	中国	化学与环境学院	2016.6-2018.6
2	徐超	博士后	女	31	无	中国	化学与环境学院	2016.9-2018.12
3	罗时荷	博士后	女	33	无	中国	化学与环境学院	2016.9-2018.12
4	刘婷婷	博士后	女	31	无	中国	化学与环境学院	2016.9-2018.12
5	Palanivel Sathishkuma	博士后	男	39	无	印度	化学与环境学院	2017.2-2019.2
6	孙建良	博士后	男	32	无	中国	化学与环境学院	2017.9-
7	顾立强	博士后	男	34	无	中国	化学与环境学院	2017.10-2019.10
8	余乐	博士后	男	35	无	中国	广州天赐高新材料股份有限公司/化学与环境学院	2017.3-2019.3
9	曹智雄	博士后	男	32	无	中国	化学与环境学院	2018.1-
10	王子嘉	博士后	男	31	无	中国	化学与环境学院	2018.8-
11	王佳佳	博士后	女	27	无	中国	化学与环境学院	2018.9-
12	Budigi Lokesh	博士后	男	33	无	印度	化学与环境学院	2018.12-
13	Reddivari Chenna Krishna Reddy	博士后	男	32	无	印度	化学与环境学院	2018.12-
14	陈军	博士后	男	30	无	中国	华南师范大学	2017.9-
15	史文俊	博士后	男	32	无	中国	华南师范大学	2018.1-
16	易晓辉	博士后	男	31	无	中国	华南师范大学	2018.1-
17	胡立新	博士后	男	26	无	中国	华南师范大学	2018.9-
18	杨愿愿	博士后	男	32	无	中国	华南师范大学	2018.9-
19	刘思思	博士后	男	30	无	中国	华南师范大学	2018.11-
20	谢世磊	访问学者	男	31	讲师	中国	东莞理工学院	2018.3-2018.7
21	陈忠明	访问学者	女	32	讲师	中国	东莞理工学院	2018.3-2018.7
22	常学义	访问学者	男	37	助理研究员	中国	东莞理工学院	2018.3-2018.7
23	邹红丽	访问学者	女	45	讲师	中国	广东第二师范学院	2018.9-2019.7
24	刘伟峰	访问学者	男	33	讲师	中国	周口师范学院	2018.9-2019.7
25	赵晓洋	访问学者	男	37	讲师	中国	河南工业职业技术学院	2018.9-2019.7
26	杨伟涛	其他	男	58	教授	美国	杜克大学	2014.4-
27	朱超原	其他	男	63	教授	日本	台湾交通大学	2016.10-

注：（1）流动人员包括“博士后研究人员、访问学者、其他”三种类型，请按照以上三种类型进行人员排序。（2）在“实验室工作期限”在实验室工作的协议起止时间。

四、学科发展与人才培养

1、学科发展

简述实验室所依托学科的年度发展情况，包括科学研究对学科建设的支撑作用，以及推动学科交叉与新兴学科建设的情况。

实验室一直鼓励化学、环境和材料等学科的交叉，通过发展理论计算化学方法，理解环境科学中污染物的化学反应和降解机制；将分子模拟手段引入材料设计，为环境功能材料的研发提供新的研究思路；同时，也关注更为广泛的理论方法，比如使用多尺度模拟和过程工程模拟等手段，理解环境中污染物的时间空间分布和演化等问题。这些研究通过将理论计算和模拟引入环境科学的研究，和环境科学中已有实验手段结合，推动了相关学科的发展。

2、科教融合推动教学发展

简要介绍实验室人员承担依托单位教学任务情况，主要包括开设主讲课程、编写教材、教改项目、教学成果等，以及将本领域前沿研究情况、实验室科研成果转化为教学资源的情况。

围绕量子理论化学与环境治理技术开设多门主讲课程：

开设主讲课程：分子设计导论、结构化学、群论、材料结构化学、材料科学基础、化工基础、大气污染控制工程、环境化学、环境化学实验、环境监测、环境工程经济学、环境工程微生物学、环境工程微生物学实验、环境工程原理、专业英语等 30 多门专业课程。

3、人才培养

（1）人才培养总体情况

简述实验室人才培养的代表性举措和效果，包括跨学科、跨院系的人才交流和培养，与国内、国际科研机构或企业联合培养创新人才等。

重点实验室主要依托华南师范大学化学与环境学院开展人才培养工作，化学与环境学院现有化学(师范类)、环境科学、环境工程、材料化学、新能源材料与器件共 5 个本科专业；拥有化学一级博士点(包括物理化学、无机化学、有机化学、分析化学、高分子化学与物理、环境化学、新能源材料化学与物理等 7 个二级博士点)和化学一级硕士点(包括无机化学、有机化学、分析化学、物理化学、高分子化学与物理等 5 个二级理学硕士点)、环境科学与工程一级硕士点、应用化学、材料物理与化学等 3 个工学硕士点、课程教学论(化学)等硕士点，以及面对中学化学教师的学科教学(化学)教育硕士点。学院 2018 年共有在读硕士生 421 名，在读博士生 33 名+2 名留学生博士，其中 2018 年入学博士生 12 人，2018 年入学硕士生 172 人。2018 年研究生毕业 155 名，其中硕士生毕业 147 名，博士生毕业 7 名。

联合培养研究生方面，目前本实验室与美国杜克大学、日本九州大学、香港城市大学、台湾交通大学、中科院北京化学研究所、中科院广州地球化学研究所、暨南大学、中山大学、吉林大学、惠州国展电子有限公司、佛山海天调味食品有限公司等研究院所、高等院校和大中型企业开展人才联合培养，并有密切科技攻关合作，相互开放，相互促进，取得明显成效，促进了本实验室依托的学科走强国际化、产学研等多种人才培养模式。

(2) 研究生代表性成果（列举不超过 3 项）

简述研究生在实验室平台的锻炼中，取得的代表性科研成果，包括高水平论文发表、国际学术会议大会发言、挑战杯获奖、国际竞赛获奖等。

1. Photocatalytic activity and the radiative lifetimes of excitons via an ab initio approach, Linping Hu, Chao Xu, Liang Peng, Feng Long Gu*, and Weitao Yang*, J. Mater. Chem. A 6 (31): 15027-15032, 2018.
2. Long-term feeding of elemental sulfur alters microbial community structure and eliminates mercury methylation potential in SRB-abundant activated sludge, Wang, J.-t.; Zhang, L.; Kang, Y.; Chen, G.; Jiang, F.*, Environ. Sci. Technol. 2018, 52, 8, 4746-4753.
3. Water-promoted synthesis of fused bicyclic triazolines and naphthols from oxa(aza)bicyclic alkenes and transformation via a novel, Wenkun Chen, Wen Yang, Ruihua Wu and Dingqiao Yang*, Green Chem., 2018, 20, 2512-2518.

(3) 研究生参加国际会议情况（列举 5 项以内）

序号	参加会议形式	学生姓名	硕士/博士	参加会议名称及会议主办方	导师
1	口头报告+发表会议论文	陈志聪	硕士	2018 The 2nd International Seminar on Materials Science and Application (SMSA 2018)	孙丰强
2	口头报告发表会议论文	孙容容	博士	The 15th IWA Leading-Edge Conference on Water and Wastewater Technologies 主办方: International Water Association	江峰
3	发表会议论文	林熹	硕士	The Second International Conference on Materials Chemistry and Environmental Protection (MEEP2018)	孙丰强
4	发表会议论文	潘子钊	硕士	8th International Conference on Manufacturing Science	孙丰强

				and Engineering (ICMSE 2018)	
5	墙报	谭娟娟	博士	中国化学会第 31 届年会	顾凤龙
6	墙报	胡琳萍	博士	中国化学会第 31 届年会	顾凤龙
7	墙报	胡赢	博士	中国化学会第 31 届年会	顾凤龙
8	墙报	甘汉麟	硕士	中国化学会第 31 届年会	彭亮
9	墙报	李波	硕士	中国化学会第 31 届年会	许旋

注：请依次以参加会议形式为大会发言、口头报告、发表会议论文、其他为序分别填报。所有研究生的导师必须是实验室固定研究人员。

五、开放交流与运行管理

1、开放交流

(1) 开放课题设置情况

简述实验室在本年度内设置开放课题概况。

实验室组织教师对已经获批的 15 项开放课题进行了考核，并新通过 4 位年青教师的开放课题和 5 位年轻教师自主课题的申请。

序号	课题名称	经费额度	承担人	职称	承担人单位	课题起止时间
1	新型镍催化非活化烷基卤代物与 CO ₂ 的还原羧化反应的理论研究	3 万	段阿冰	讲师	湖南大学	2019.1.1-2020.12.31
2	有机发光分子中三重态利用的理论研究	3 万	段瑞红	师资博士后	郑州大学	2018.11-2019.12
3	硼氮杂环化合物的分子设计及催化 CO ₂ 氢化反应的应用	3 万	邵佑湘	副研究员	中山大学	2018.11-2020.11
4	挥发性全氟化合物大气氧化形成全氟羧酸的机理研究	3 万	孙延慧	副教授	青岛科技大学	2019.1-2020.12
5	β -内酰胺类抗生素光降解动力学研究	3 万	谢宇	特聘副研究员	华南师范大学	2019.1-2020.12
6	基于生物质碳的复合材料的制备及其电化学电容性能研究	3 万	陈新丽	博士	华南师范大学	2018.12-2020.12
7	基于 Z η -Nakamura 理论的非绝热动力学模型	3 万	徐超	特聘副研究员	华南师范大学	2018.11-2020.11
8	环境中爆炸性硝基化合物检测用荧光传感薄膜的制备及	3 万	刘聪	副教授	华南师范大学	2018.12-2019.12

	应用研究					
9	用于光催化降解材料的激子动力学	3万	兰峥岗	教授	华南师范大学	2019.1-2020.12

注：职称一栏，请在在职人员填写职称，学生填写博士/硕士。

(2) 主办或承办大型学术会议情况

序号	会议名称	主办单位名称	会议主席	召开时间	参加人数	类别
1	环境科学高端论坛	华南师范大学	应光国	2018.4	200	全国性
2	化学品暴露与环境风险国际研讨会	华南师范大学	应光国	2018.11	150	全球性

注：请按全球性、地区性、双边性、全国性等类别排序，并在类别栏中注明。

(3) 国内外学术交流与合作情况

请列出实验室在本年度内参加国内外学术交流与合作的概况，包括与国外研究机构共建实验室、承担重大国际合作项目或机构建设、参与国际重大科研计划、在国际重要学术会议做特邀报告的情况。请按国内合作与国际合作分类填写。

国际合作方面：分别与美国杜克大学、美国加州大学洛杉矶分校、美国加州州立大学北岭分校、日本九州大学、香港城市大学、台湾交通大学有紧密和合作和交流。与香港城市大学一起承担广东省科技厅对外合作计划项目，与日本九州大学共建国际合作平台。积极响应国家发展布局，加强和香港澳门地区研究机构的联系，寻求合作机会，为大湾区建设贡献自身力量。

2018年4月9日-10日，“环境科学高端论坛暨华南师范大学环境研究院成立大会”在华南师范大学大学城校区国际会议厅举行。华南师范大学朱孔军书记参加了成立大会与揭牌仪式。多位院士和数十位长江学者、国家杰青参加了这次会议。这次论坛是针对环境研究领域的新进展、新问题、新技术、新对策进行讨论，为解决中国环境问题提供新思路，为环境科学与工程学科发展提供新思想的一次研讨会。

(2) 2018年11月19-21日举办“化学品暴露与环境风险国际研讨会”，探讨化学品管理与生态风险的研究进展与发展方向。会议邀请国外环境领域的著名专家学者针对化学品的环境暴露、生态和健康风险进行讨论，为中国化学品管理提供新思想。

(3) 多次组织人员参加国际会议，其中杨伟涛教授、应光国教授、顾凤龙教授、朱超原教授、李晓敏教授、陈长二研究员、兰峥岗研究员、彭导灵研究员均在国际会议上做报告。

国内合作方面：吉林大学、北京大学、中山大学、山东大学、暨南大学、

中科院广州地化所等高校院所开展合作互访活动。组织科研人员和学生参加国内会议，促进跟各大高校科研人员的交流。

2018年度实验室出访134人次。共接待日常来访学者100多人次，其中境外33人次。

(4) 科学传播

简述实验室本年度在科学传播方面的举措和效果。

承接各类企业研发难题，帮助企业科技创新培养科研人才，提供清洁生产审核咨询、环保技术咨询、社会责任报告与咨询、技术与产品推广、人才培养与培训等。对外开放参观，承担各级科技活动周活动，进行土壤重金属污染与修复、环境评估、水质监测，水体治理等方面的宣传和技术交流。

2、运行管理

(1) 学术委员会成员

序号	姓名	性别	职称	年龄	所在单位	是否外籍
1	吴云东	男	教授	61	北京大学深圳研究生院	是
2	曾永平	男	研究员	57	暨南大学	是
3	杨伟涛	男	教授	56	美国杜克大学/华南师范大学	是
4	俞汉青	男	教授	52	中国科学技术大学	否
5	陈景文	男	教授	49	大连理工大学	否
6	高明远	男	研究员	51	中国科学院化学研究所	否
7	吴丰昌	男	研究员	54	中国环境科学研究院	否
8	方维海	男	教授	63	北京师范大学	否
9	葛茂发	男	研究员	48	中国科学院化学研究所	否
10	张东辉	男	研究员	51	中国科学院大连化学物理所	否
11	苏忠民	男	教授	57	东北师范大学	否
12	谢代前	男	教授	54	南京大学	否
13	张瑞勤	男	教授	55	香港城市大学	是

14	杨世和	男	教授	60	香港科技大学	是
15	沈伟然	男	正高级工程师	75	天津市环境保护科学研究院	否
16	顾凤龙	男	教授	51	华南师范大学	是

(2) 学术委员会工作情况

请简要介绍本年度召开的学术委员会情况，包括召开时间、地点、出席人员、缺席人员，以及会议纪要。

实验室在2018年12月底举行了年度学术会议视频会议，会议由实验室主任顾凤龙教授进行了实验室2018年度工作汇报，各位专家对于2018年度实验室工作给予肯定，在实验室研究方向上给予调整的建议。中科院高明远教授指出实验室建设虽然不容易，但目前来看有些规模了，也看到了学校的支持和实验室人员的业绩。就三个研究方向来看，第一部分是微观尺度的理论模拟，涉及分子反应机理，第三个部分更多涉及宏观尺度的理论工作。但中间部分的环境功能材料，没看到关键的科学问题和清晰的学术方向，需要进一步督导加强的点。同时也建议，从明年开始得规划一下重大项目，否则，学术研究方向还容易散。

(3) 主管部门和依托单位支持情况

简述主管部门和依托单位本年度为实验室提供实验室建设和基本运行经费、相对集中的科研场所和仪器设备等条件保障的情况，在学科建设、人才引进、团队建设、研究生培养指标、自主选题研究等方面给予优先支持的情况。

依托单位本年度为实验室提供实验室建设和基本运行经费550万元，提供科研场地4100m²，在设备购置和实验室改造方面提供了一定的保障和帮助。

主管单位本年度为实验室提供实验室建设经费200万元。

3、仪器设备

简述本年度实验室大型仪器设备的使用、开放共享情况，研制新设备和升级改造旧设备等方面的情况。

实验室对仪器设备的使用和维护制定了完善的规章制度，对仪器设备、图书进行共享。本年度实验室大型仪器设备一直开放提供给学院各位老师使用，外单位人员可以通过预约前来使用。另外添置了新的测试设备以及进行服务器扩容，以便更好地进行科学研究，并对现有仪器设备进行日常保养和及时的维修。

六、审核意见

1、实验室负责人意见

实验室承诺所填内容属实，数据准确可靠。

数据审核人：
实验室主任：
(单位公章)
年 月 日

2、依托高校意见

依托单位年度考核意见：
(需明确是否通过本年度考核，并提及下一步对实验室的支持。)

依托单位负责人签字：
(单位公章)
年 月 日