项目名称	原位可控制备环保功能材料及其催化转化污染物增效机制
申报奖种和等级	天津市自然科学奖二等奖
主要完成单位	河北工业大学、中国科学院大连化学物理研究所、西南科技大学、东北大学
主要完成人	梁金生、王菲、刘岳峰、边亮、周鹏飞、赵思凯、郝铭、李世艳
提名单位	河北工业大学
项目简介	环境污染物的绿色转化与资源化利用是我国生态文明建设和绿色高质量发展的重大需求。但长期以来，在水和空气中典型污染物的绿色转化与资源化利用技术开发过程中，仍面临催化材料效率不足、成本偏高、性能不稳定等瓶颈问题。为此，在国家 863 高技术研究发展计划、国家重点研发计划和国家自然科学基金等科研项目的资助下，历经十余年研究，基于典型结构硅酸盐矿物材料微结构特征，开展了“原位可控制备环保功能材料及其催化转化污染物增效机制”研究工作，攻克了催化材料构效关系和催化机理等共性理论难题。主要成果如下： （1）发现了典型结构硅酸盐矿物调控半导体材料微结构及催化性能规律。在国际上首次实现了对海泡石内部孔道和电气石原子结构的显微观察，揭示了海泡石、电气石和斜发沸石等典型结构硅酸盐矿物对光催化半导体材料生长状态和光电化学性质的影响规律及调控机制；阐明了硅酸盐矿物和半导体材料在光催化降解有机污染物过程中协同作用的物理化学机制，提出了硅酸盐矿物调控纳米半导体材料微结构及分布特征的新方法。 （2）建立了典型结构硅酸盐矿物表面原位合成纳米催化剂的构效关系理论模型。结合理论模拟计算对典型硅酸盐矿物晶体结构进行解析，进一步从实验角度验证了硅酸盐矿物结构特性对其表面负载催化剂颗粒尺寸、表面缺陷、化学价态的调控机制及其与低温脱硝性能的关联机制；发现了污染物分子在矿物晶格内部及表面传输过程并揭示了界面电子转移机制，为高性能低成本纳米催化剂的构筑及污染物分子的绿色转化提供了理论基础与技术指导。 （3）发现了原子掺杂纳米催化剂催化转化小分子气体污染物性能衰减规律。揭示了原子掺杂对纳米催化剂生长尺寸、结晶度以及配位环境的影响机制，解析了纳米催化剂结构与催化转化小分子气体污染物性能之间的构效关系；阐明了原子掺杂量对其在催化剂表面占位行为的影响规律与机理，发现了高反应活性纳米催化剂的构筑方法及其性能衰减影响因素，为高性能、长寿命环境催化材料技术创新提供了理论支撑。 项目发表 SCI 论文 100 余篇，授权国家发明专利 20 余项，7 篇代表性论文得到 Nat Commun、Environ Sci Techno 等高水平期刊引用及中国工程

	院院士贺泓研究员、欧洲科学院院士 Francesc Illas 教授等国内外知名专家的正面评价，SCI 他引 372 次；在科学出版社出版《计算矿物学》专著 1 部，在化学工业出版社出版《生态环境功能材料》教育部材料类专业教学指导委员会规划教材 1 部；培养研究生和本科生共计 600 余人。
主要技术支撑材料	**1.代表性论文（专著）** [1] Fei Wang, Zhibo Xie, Jinsheng Liang, Baizeng Fang, Yu'ang Piao, Ming Hao, Zishuo Wang. Tourmaline-Modified $FeMnTiO_x$ Catalysts for Improved Low-Temperature NH_3-SCR Performance, Environmental Science & Technology, 53 (2019) 6989-6996. [2] Yu'ang Piao, Qian Jiang, Hao Li, Hiroaki Matsumoto, Jinsheng Liang, Wei Liu, Cuong Pham-Huu, Yuefeng Liu, Fei Wang. Identify Zr Promotion Effects in Atomic Scale for Co-Based Catalysts in Fischer–Tropsch Synthesis, ACS Catalysis, 10 (2020) 7894-7906. [3] Yuedan Zhang, Lijuan Wang, Fei Wang, Jinsheng Liang, Songsong Ran, Jianfeng Sun. Phase transformation and morphology evolution of sepiolite fibers during thermal treatment, Applied Clay Science, 143 (2017) 205-211. [4] Ying Ma, Zhanglong Guo, Qian Jiang, Kuang-Hsu Wu, Huimin Gong, Yuefeng Liu. Molybdenum carbide clusters for thermal conversion of CO_2 to CO via reverse water-gas shift reaction. Journal of Energy Chemistry, 50 (2020) 37-43 [5] Shiyan Li, Qingqing Gu, Ning Cao, Qian Jiang, Chi Xu, Chengfa Jiang, Congmei Chen, Cuong Pham-Huu Yuefeng Liu. Defect Enriched N-Doped Carbon Nanoflakes as Robust Carbocatalysts for H_2S Selective Oxidation, Journal of Materials Chemistry A, 8 (2020) 8892-8902. [6] Ming Hao, Hao Li, Li Cui, Wei Liu, Baizeng Fang, Jinsheng Liang, Xinlei Xie, Dongxu Wang, Fei Wang. Higher Photocatalytic Removal of Organic Pollutants Using Pangolin-Like Composites Made of 3–4 Atomic Layers of MoS_2 Nanosheets Deposited on Tourmaline, Environmental Chemistry Letters, 19 (2021) 3573-3582. [7] Pengfei Zhou, Yanbai Shen, Sikai Zhao, Guodong Li, Baoyu Cui, Dezhou Wei, Yansong Shen. Synthesis of Clinoptilolite-Supported $BiOCl/TiO_2$ Heterojunction Nanocomposites with Highly-Enhanced Photocatalytic Activity for the Complete Degradation of Xanthates under Visible Light, Chemical Engineering Journal, 407 (2021) 126697. [8] 边亮，宋绵新，董发勤，李海龙. 计算矿物学 （第一版）[M]. 科学出版社，2021. **2.代表性论文（专著）被他人引用的情况** [1] Guangzhi He, Meng Gao, Yue Peng, Yunbo Yu, Wenpo Shan, Hong He. uperior Oxidative Dehydrogenation Performance toward NH_3 Determines the Excellent Low-Temperature NH_3-SCR Activity of Mn-Based Catalysts, Environmental Science & Technology, 55 (2021) 6995-7003. [2] Kaiqian Shu, Chitiphon Chuaicham, Yuto Noguchi, Longhua Xu, Keiko

Sasaki. In-situ hydrothermal synthesis of Fe-doped hydroxyapatite photocatalyst derived from converter slag toward xanthate photodegradation and Cr(VI) reduction under visible-light irradiation, Chemical Engineering Journal, 459 (2023) 141474.
[3] Chao Yang, Yeshuang Wang, Meisheng Liang, Zhelin Su, Xuan Liu, Huiling Fan, Teresa J. Bandosz. Towards improving H_2S catalytic oxidation on porous carbon materials at room temperature: A review of governing and influencing factors, recent advances, mechanisms and perspectives, Applied Catalysis B: Environmental, 323 (2023) 122133.
[4] Hailing Yu, Caiqi Wang, Xin Xin, Yao Wei, Shenggang Li, Yunlei An, Fanfei Sun, Tiejun Lin, Liangshu Zhong. Engineering ZrO_2–Ru interface to boost Fischer-Tropsch synthesis to olefins, Nature Communications, 15 (2024) 5143.
[5] Han-Wen Cheng, Shan Wang, Guanyu Chen, Zhengwang Liu, Dominic Caracciolo, Merry Madiou, Shiyao Shan, Jincang Zhang, Heyong He, Renchao Che, Chuan-Jian Zhong. Insights into Heterogeneous Catalysts under Reaction Conditions by in Situ/Operando Electron Microscopy, Advanced Energy Materials, 12 (2022) 2202097.
[6] Ruifeng Wang, Binglian Liang, Xiaoli Yang, Xuning Li, Yaru Zhang, Guodong Liu, Xiong Su, Yanqiang Huang, Tao Zhang. Critical role of sodium migration in iron-based FT- zeolite tandem catalyst system for syngas hydrogenation to gasoline, Applied Catalysis B: Environmental, 322 (2023) 122132.
[7] Xin Huang, Daniel Eggart, Gangqiang Qin, Bidyut Bikash Sarma, Abhijeet Gaur, Jiuzhong Yang, Yang Pan, Mingrun Li, Jianqi Hao, Hongfei Yu, Anna Zimina, Xiaoguang Guo, Jianping Xiao, Jan-Dierk Grunwaldt, Xiulian Pan, Xinhe Bao. Methyl radical chemistry in non-oxidative methane activation over metal single sites, Nature Communications, 14 (2023) 5716.
[8] Yu Sun, Yu Fu, Yulong Shan, Jinpeng Du, Zhongqi Liu, Meng Gao, Xiaoyan Shi, Guangzhi He, Sen Xue, Xuewang Han, Yunbo Yu, Hong He. Si/Al Ratio Determines the SCR Performance of Cu-SSZ-13 Catalysts in the Presence of NO_2, Environmental Science & Technology, 56 (2022) 17946-17954.

3. 主要知识产权和标准规范

[1] 王菲；郝铭；梁金生；王东旭；王玉磊. 一种高分散的海泡石族矿物负载 Au 单原子催化剂的制备方法. ZL 202111559014.3
[2] 王菲；王东旭；梁金生；郝铭；王玉磊. 一种微波辅助过氧化氢改性海泡石族矿物负载 Co 单原子催化剂的制备方法. ZL 202111585563.8.
[3] 王菲；朴宇昂；梁金生；解智博；王雨林；张泽. 一种整体式蜂窝低温 SCR 脱硝催化剂及其制备方法. ZL 201810172992.4.
[4] 刘岳峰；朴宇昂；蒋倩. 一种锆修饰无定型介孔 SiO_2 负载钴基费托催化剂及其制备方法. ZL 20201139186.9.
[5] 刘岳峰；冯璐；马颖. 一种碳纳米管负载钯钙整体催化剂及在肉桂醛加氢中的应用. ZL 201911025430.8.