**一、成果基本信息**

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **序号** | **成果名称** | **主要完成人** | **主要完成单位** | **奖种** | **提名者** | **拟提名等级** |
| 1 | 矿物界面吸附和催化反应的相关机制 | 杨刚、祝畅、王谦 | 西南大学 | 自然科学奖 | 重庆市教育委员会 | 三等奖 |

**二、项目简介**

分子筛(沸石)等矿物在工业上有重要的、广泛的应用；蒙脱石等矿物在众多的地球化学、环境控制等过程中发挥关键作用；钾长石等矿物在生命起源中起到关键的作用。项目从分子尺度阐明矿物活性位结构及催化反应机理、离子吸附及无机污染物控制等机制、矿物与生物分子作用机制及在生命起源中的作用等。研究结果有助于深入理解这些基础而重要的过程，同时为矿物应用提供必要的理论依据。

主要科学发现点如下：

1. 提出Fe/ZSM-5催化剂多种活性位结构，尤其是过氧化铁结构；揭示氢预处理会改变Fe/ZSM-5活性位结构并进而提升苯制苯酚催化效率；发现三配位骨架Fe比通常研究的非骨架Fe有更优异催化苯制苯酚活性。揭示TS-1的两种Lewis酸结构，发现M4+-沸石有Brϕnsted酸并揭示其来自一种新型缺陷位。发现分子筛缺陷位的存在显著促进葡萄糖异构化反应；揭示Na+、临近硅羟基和溶剂在葡萄糖转化反应中各自贡献，提出它们之间的协同作用保证了反应的高效率和高选择性。结果为矿物催化剂的设计及其应用提供重要的科学依据。

2. 矿物界面离子吸附中，电场强度起到关键作用；仅调节电场就能引起阳离子特异性序列反转；阴离子与矿物形成的复合物可比金属的更稳定；矿物孔道效应对界面吸附显著影响且阐明机制。U(VI)与矿物形成稳定复合物，腐殖质将U(VI)降解为难溶性U(IV)而分离，提出U(VI)降解机理并给出各因素影响机制。亚磷酸配体直接能进行U(VI)降解，遵循质子/电子协同机制。常温空气(O2)与SO2在矿物表面反应就能高效生成酸雨，揭示酸雨形成真正原因(O3等氧化剂含量很低，很难形成酸雨)。碳材料同时高效吸附重金属、阳离子污染物。结果为地球化学、环境控制等提供重要依据。

3. 阐明各种矿物与生物分子的作用机制，指出生物分子主导构象是兼性离子。矿物所带电荷在稳定兼性构象方面起到关键作用。兼性离子是生物分子的活性构象。矿物表面常温就能生成兼性构象，且氨基酸侧链对构象转化过程产生显著影响。矿物表面电荷对生物反应起到显著促进作用。提出只要有电场，生命就能在矿物表面诞生，即使没有水、没有盐，这与“多肽是在无水条件下形成”这一事实吻合。结果为矿物在生命起源中的角色提供新认识。

发表SCI论文127篇，最高影响因子13.084，其中中科院1区或影响因子>5.0的39篇。6篇邀请综述，5篇封面报道；主编1部专著和撰写8部章节。论文他引2700多次，成果中的20篇论文SCI他引237次（5篇代表性论文他引40次）。主持人担任Current Chinese Science, PLoS One, 地球科学前沿等期刊编委，应邀在多个会议上做大会报告。先后获得西南大学创新团队和重庆市创新研究群体。

**三、代表性论文、专著目录(不超过5篇)**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 序号 | 论文、专著名称/刊名/作者 | 影响因子 | 年卷页码（xx 年xx卷-xx 页） | 发表时间年 月 日 | 是否国内完成 | 通讯作者 | 第一作者 | SCI 他引次数 | 他引总次数 |
| 1 | Glucose Conversions Catalyzed by Zeolite Sn-BEA: Synergy among Na+ Exchange, Solvent and Proximal Silanol Nest as Well as Critical Specifics for Catalytic Mechanisms | 13.084 | *ACS Catal.* 2018, *8*, 6691-6698杨刚，周丽君 | 2018-06-14 | 是 | 杨刚 | 杨刚 | 4 | 6 |
| 2 | Electric Fields within Clay Materials: How to Affect the Adsorption of Metal Ions | 8.128 | *J. Colloid Interf. Sci.* 2017, *501*, 54-59/李雄，李航，杨刚 | 2017-04-13 | 是 | 李雄 | 杨刚 | 15 | 21 |
| 3 | Abiotic Reduction of Uranium(VI) with Humic Acid at Mineral Surfaces: Competing Mechanisms, Ligand and Substituent Effects, and Electronic Structure and Vibrational Properties | 8.071 | *Environ. Pollut.* **2019**, *254*, 113110.王谦，祝畅，黄笑笑，杨刚 | 2019-08-27 | 是 | 杨刚 | 王谦 | 5 | 9 |
| 4 | Catalytic Conversions of Atmospheric Sulfur Dioxide and Formation of Acid Rain over Mineral Dusts: Molecular Oxygen as the Oxygen Source | 7.086 | *Chemosphere* **2019**, *217*, 18-25.贠洁娜，祝畅，王谦，黄笑笑，杨刚 | 2018-10-30 | 是 | 杨刚 | 贠洁娜 | 7 | 12 |
| 5 | Mechanisms and Reactivity Differences of Proline-mediated Catalysis in Water and Organic Solvents | 6.119 | *Catal. Sci. Technol.* 2016, *6*, 3378-3385/杨刚，周丽君 | 2016-04-06 | 是 | 杨刚 | 杨刚 | 9 | 13 |
| 合计 | 40 | 61 |