



## 机构设置

Research Institutions

[科研组织管理办公室](#)[大气环境化学研究所](#)[环境理论化学研究所](#)[环境生态学研究所](#)[生态环境大数据创新研究中心](#)

## 环境理论化学研究所

[首页 / 机构设置 / 环境理论化学研究所](#)

## 环境理论化学与实验研究所

环境理论计算与实验是王文兴院士于2003年成立山东大学环境研究院之初确立的三个方向之一，用理论化学的方法研究环境问题一直是王院士的夙愿。将理论计算与实验有机结合一直是王院士追求的目标。环境理论化学与实验研究所的成立为实验这一目标奠定了基础。环境理论化学与实验研究所将量子化学计算、分子模拟与实验相结合，研究环境污染物在大气、水体、土壤及生物体等典型环境中的形成与降解过程、环境毒性评估、二次气溶胶成核机制、海洋气溶胶表面的多相反应等。拥有由高性能SGI工作站，浪潮刀片式服务器、50余台Dell服务器以及由200余台PC机组成的并行计算局域网，现有Gaussian、Discovery Studio、Materials Studio、Siesta、Charmm、Chemshell、Turbomole、Vasp、Polyrate、Mesmer等程序及一套超低温基质隔离系统和一套偏振调制界面反射吸收红外光谱装置，可满足化学基元过程实验和理论计算需要。同时具有完备的酶分离纯化、细胞及生态毒理学实验体系，建有研究级倒置荧光显微成像系统、体式显微镜、流式细胞仪、荧光定量PCR仪、多功能酶标仪、蛋白质纯化系统、蛋白电泳系统、凝胶成像仪、荧光及紫外光谱仪，在分子水平上对污染物的毒性机制、生物酶作用下污染物的转化机理进行实验验证。

研究方向：

- (1) 二噁英的形成与降解机理；
- (2) 典型农药在环境中的降解机理(化学降解和酶催化降解)；
- (3) 大气中挥发性有机化合物的氧化及气溶胶成核的微观机理；
- (4) 溴系阻燃剂类化合物的降解机理；
- (5) 多环芳烃的大气转化及硝基多环芳烃的形成机理；
- (6) 新型PPCPs 类污染物的降解机理；
- (7) 氮氧化物在海盐粒子表面非均相反应的微观机理；
- (8) 有机物对水生生物急性毒性的预测模型及作用机理；
- (9) 颗粒污染物的生物效应和环境过程；
- (10) 典型环境污染物与人体关键大分子(DNA、蛋白质等)的相互作用机理；
- (11) 大气细颗粒中微生物的种类分布以及其健康影响；
- (12) 气溶胶的界面非均相反应。

主持项目：

环境理论化学研究室先后承担2项国家自然科学基金重点项目、2项“973”项目子课题、1项“863”项目子课题、30余项国家自然科学基金面上项目及青年项目、2项山东省杰出青年基金、2项教育部新世纪优秀人才等。总经费2500余万元。

研究成果:

在Environ. Sci. & Technol.、Atmos. Chem. Phys., Sci. Total Environ.、Atmos. Environ.、Chemosphere、Environ. Pollut.等环境科学领域权威期刊上发表SCI学术论文200余篇, 其中在Environ. Sci. & Technol.发表论文14篇。

学生培养:

培养全国百篇优秀博士论文获得者1人、教育部学术新人奖获得者1名、研究生国家奖学金8名、研究生资助创新基金4名、与国外知名高校联合培养研究生6名。

主要成员:

环境理论化学与实验研究所现有教师9人, 教授5人, 副教授3人, 讲师1人。其中中国工程院院士1人, 泰山学者1人, 新世纪优秀人才2人, 山东省杰青2人。在读研究生50余人, 已毕业研究生40余人。

教师队伍:

王文兴院士, 张庆竹教授, 杜林教授, 孙孝敏教授, 何茂霞教授, 姜威副教授, 徐菲副教授, 李延伟副教授, 丁磊博士

#### (一) 代表性科研项目

1. 应用人工生物膜研究生物界面对碳纳米颗粒沉积的影响 (国家自然科学基金面上项目, 69万元, 2018-2021, 姜威主持)
2. “大气中有机胺和氨气协同作用下酸性气体成核机理的量子化学研究” (国家自然科学基金委面上项目, 71.5万元, 2017-2020, 王文兴主持)
3. “二次有机气溶胶的界面反应及其在灰霾形成中的作用机制” (国家自然科学基金委重大研究计划重点支持项目, 262万元, 2017-2020, 杜林主持)
4. “挥发性有机物的大气反应” (山东省自然科学基金杰出青年基金, 60万元, 2017-2020年, 杜林主持)
5. “活性卤素自由基复合物的实验探测与理论研究” (国家自然科学基金委面上项目, 80万元, 2016-2019, 杜林主持)
6. “生物酶作用下多氯联苯的降解机理研究” (国家自然科学基金委面上项目, 82.8万元, 2016-2019, 张庆竹主持)
7. “多环芳烃在大气颗粒物表面的非均相反应机理模拟研究” (国家自然科学基金委面上项目, 90万元, 2015-2018, 王文兴主持)
8. “Y家族DNA聚合酶作用下多环芳烃DNA加合物的跨损伤DNA合成机理研究” (国家自然科学基金委青年项目, 23.2万元, 2015-2018, 李延伟主持)
9. “新型有机污染物降解机理的量子化学计算与分子模拟” (国家自然科学基金委重点项目, 300万元, 2014-2018, 张庆竹、王文兴主持)
10. “大气分子复合物的重要物理化学性质的研究” (国家自然科学基金委青年基金项目, 28万元, 2015-2017, 杜林主持)
11. “有机酸在气溶胶多种成核机制中作用机理的理论研究” (国家自然科学基金委青年项目, 24万元, 2014-2017, 徐菲主持)

12. “肟类燃料及其氧化衍生物参与大气成核过程研究” (山东省自然科学基金委青年基金, 12万, 2014-2017, 杜林主持)
13. “大气中多环芳烃被OH/NO<sub>2</sub>及NO<sub>3</sub>/NO<sub>2</sub>氧化形成硝基多环芳烃的机理” (国家自然科学基金委面上项目, 2014-2017, 胡敬田主持)
14. “纳米颗粒与磷脂分子的相互作用及对磷脂层结构的影响机制” (国家自然科学基金委面上项目, 80万元, 2014-2017, 姜威主持)
15. 应用光蚀刻微模型研究碳纳米颗粒在多相孔隙介质中的迁移规律, (国家自然科学基金委青年项目, 26万元, 2014-2016, 姜威主持)
16. 典型持久性有机污染物在多相体系中的微观降解机理 (教育部新世纪优秀人才计划, 50万元, 2013-2016, 孙孝敏主持)
17. “典型二噁英在气相与气-固界面微观降解机理的理论研究” (国家自然科学基金委面上项目, 80万元, 2013-2016, 孙孝敏主持)
18. “大气中氮氧化物与海盐粒子的非均相反应机理” (国家自然科学基金委面上项目, 70万元, 2012-2015, 王文兴主持)
19. “QM/MM方法研究生物酶作用下典型有机农药的降解机理” (国家自然科学基金委面上项目, 65万元, 2012-2015, 张庆竹主持)
20. “化学品种类快速甄别及毒性预测技术 (有机化学品毒理效应的计算毒理学预测技术)” (国家科技部“863”计划, 93.7万元, 2012-2014, 张庆竹、孙孝敏主持)
21. “多溴联苯醚类大气环境中微观降解机理的理论研究” (国家自然科学基金委面上项目, 2011-2013, 36万元, 何茂霞主持)
22. “无盐囊泡相结构的实验与分子动力学模拟理论研究” (国家自然科学基金委青年基金项目, 19万元, 2010-2013, 孙孝敏主持)
23. “无盐囊泡相结构的实验与分子动力学模拟理论研究” (国家自然科学基金委青年基金项目, 19万元, 2010-2013, 孙孝敏主持)
24. “量子化学与分子模拟方法研究有机氯农药在环境中的降解机理” (山东省自然科学基金杰出青年基金, 50万元, 2009-2011年, 张庆竹主持)
25. “乙烯基醚类对流层大气化学转化过程的机理研究” (国家自然科学基金委面上项目, 2009-2011, 32万, 何茂霞主持)
26. “持久性有机污染物的典型环境过程及构效关系研究” (南大山大主持国家基金委重点项目 180万元, 2008-2011年, 经费为99万元, 王文兴, 张庆竹主持)
27. “大气环境中萜烯形成二次有机气溶胶的理论研究” (国家自然科学基金委面上项目, 28万元, 2008-2010年, 张庆竹主持)

## (二) 代表性论著

1. Shijie Liu, Long Jia, Yongfu Xu\*, Narcisse T. Tsona, Shuang shuang Ge, Lin Du\*. Photooxidation of cyclohexene in the presence of SO<sub>2</sub>: SOA yield and chemical composition. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2017, 17(21):13329-13343.
2. Wang N, Sun X\*, Chen J, Li X. Heterogeneous Nucleation of Trichloroethylene Ozonation Products in the Formation of New Fine Particles. *Scientific Reports*, 2017, 7: 1-7.
3. Lin He, Xiaomin Sun\*, Fanping Zhu, Shaojie Ren, Shuguang Wang\*. OH-initiated transformation and hydrolysis of aspirin in AOPs system: DFT and experimental studies. *Sci. Total Environ.*, (2017), 592: 33-40.

4. Qingzhu Zhang\*, Rui Gao, Fei Xu, Qin Zhou, Guibin Jiang, Tao Wang, Jianmin Chen, Jingtian Hu, Wei Jiang, and Wenxing Wang\*. Role of Water Molecule in the Gas-Phase Formation Process of Nitrated Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in the Atmosphere: A Computational Study. *Environ. Sci. & Technol.* 2014, 48 (9), 5051-5057.
5. Yanwei Li , Xiangli Shi , Qingzhu Zhang\*, Jingtian Hu, Jianmin Chen, and Wenxing Wang. Computational Evidence for the Detoxifying Mechanism of Epsilon Class Glutathione Transferase Toward the Insecticide DDT. *Environ. Sci. & Technol.* 2014, 48 (9), 5008-5016.
6. Haijie Cao, Maoxia He\*, Dandan Han, Jing Li, Mingyue Li, Wenxing Wang, Side Yao. OH-Initiated Oxidation Mechanisms and Kinetics of 2,4,4'-Tribrominated Diphenyl Ether. *Environ. Sci. & Technol.* 2013, 47(15):8238-8247.
7. Xiaomin Sun, Chenxi Zhang, Yuyang Zhao, Jing Bai, Qingzhu Zhang\*, Wenxing Wang. Atmospheric chemical reactions of 2,3,7,8-tetrachlorinated dibenzofuran initiated by an OH radical: mechanism and kinetics study. *Environ. Sci. & Technol.* 2012, 46(15): 8148-8155.
8. Fei Xu, Wannu Yu, Qin Zhou, Rui Gao, Xiaoyan Sun, Qingzhu Zhang\*, Wenxing Wang. Mechanism and direct kinetic study of the polychlorinated dibenzo-p-dioxin and dibenzofuran formations from the radical/radical cross-condensation of 2,4-dichlorophenoxy with 2-chlorophenoxy and 2,4,6-trichlorophenoxy. *Environ. Sci. & Technol.* 2011, 45(2):643-650.
9. Wannu Yu, Jingtian Hu, Fei Xu, Xiaoyan Sun, Rui Gao, Qingzhu Zhang\*, Wenxing Wang. Mechanism and direct kinetics study on the homogeneous gas-phase formation of PBDD/Fs from 2-BP, 2,4-DBP, and 2,4,6-TBP as precursors. *Environ. Sci. & Technol.* 2011, 45(5):1917-1925.
10. Chenxi Zhang, Tingli Sun, and Xiaomin Sun\*. Mechanism for OH-initiated degradation of 2,3,7,8-tetrachlorinated dibenzo-p-dioxins in the presence of O<sub>2</sub> and NO/H<sub>2</sub>O. *Environ. Sci. & Technol.* 2011, 45(11): 4756-4762.
11. Fei Xu, Hui Wang, Qingzhu Zhang\*, Ruixue Zhang, Xiaohui Qu, Wenxing Wang. Kinetic properties for the complete series reactions of chlorophenols with OH radicals - Relevance for dioxin formation. *Environ. Sci. & Technol.* 2010, 44(4):1399-1404.
12. Qingzhu Zhang\*, Wannu Yu, Ruixue Zhang, Qin Zhou, Rui Gao, Wenxing Wang\*. Quantum chemical and kinetic study on dioxin formation from the 2,4,6-TCP and 2,4-DCP precursors. *Environ. Sci. & Technol.* 2010, 44(9):3395-3403.
13. Fei Xu, Wannu Yu, Rui Gao, Qin Zhou, Qingzhu Zhang\*, Wenxing Wang. Dioxin formations from the radical/radical cross-condensation of phenoxy radicals with 2-chlorophenoxy radicals and 2,4,6-trichlorophenoxy radicals. *Environ. Sci. & Technol.* 2010, 44(17):6745-6751.
14. Xiaohui Qu, Hui Wang, Qingzhu Zhang\*, Xiangyan Shi, Fei Xu, Wenxing Wang. Mechanistic and Kinetic Studies on the Homogeneous Gas-phase Formation of PCDD/Fs from 2,4,5-Trichlorophenol, *Environ. Sci. & Technol.*, 2009, 43 (11), 4068– 4075.
15. Qingzhu Zhang, Xiaohui Qu, Hui Wang, Fei Xu, Xiangyan Shi, Wenxing Wang. Mechanism and Thermal Rate Constants for the Complete Series Reactions of Chlorophenols with H. *Environ. Sci. & Technol.*, 2009, 43 (11), 4105–4112.

16. Qingzhu Zhang\*, Shanqing Li, Xiaohui Qu, Xiangyan Shi, Wenxing Wang\*. [A quantum mechanical study on the formation of PCDD/Fs from 2-chlorophenol as precursor.](#) Environ. Sci. & Technol. 2008, 42(19):7301-7308.

17. Qingzhu Zhang, Xiaohui Qu, Wenxing Wang\*. [Mechanism of OH-initiated atmospheric photooxidation of dichlorvos: A quantum mechanical study.](#) Environ. Sci. & Technol. 2007, 41(17):6109-6116.



**F** 友情链接  
friendship Links

-----校内链接-----



-----校外链接-----



-----其他链接-----

