

2026 年度拟提名陕西省自然科学奖项目公示内容

一、项目名称

紫精基功能界面构筑及电子传输调控机制

二、提名者及提名意见

提名者：韩英锋、西北大学、教授、无机化学

提名意见：项目围绕“多层次结构对紫精基界面电子传输性能调控机制”关键科学问题，提出“重原子桥联紫精创制—界面有序组装—电子传输协同调控”研究思路。创制硫/硒/碲/锑/铋桥联紫精新结构，实现能级与光电性质定向调控，突破平面刚性紫精衍生物合成瓶颈；揭示界面作用—分子取向—电子传输构效规律，提出多位点锚定策略，实现跨界面电子高效定向传输与结构稳定性协同提升；构筑高效稳定紫精基功能界面，发展光催化、多功能传感及水系液流电池体系，推动储能体系放大验证。项目团队在化学、材料类期刊发表高质量 SCI 论文 150 余篇，获授权发明专利 20 余件，培养毕业博士和硕士研究生 20 余名。基于上述贡献，提名该项目为陕西省自然科学奖一等奖。

提名者：刘明、西安交通大学、教授、微电子学与固体电子学

提名意见：该项目提出“在紫精骨架中引入主族元素”的分子设计策略，创制了一系列具有多氧化还原中心、窄能隙等特征的主族元素桥联紫精，拓展了紫精分子的结构与功能边界。在此基础上，团队凝练形成“重原子桥联紫精创制—界面有序组装—电子传输协同调控”的学术思想，建立了具有鲜明特色的紫精基功能界面化学研究体系，深化了对分子结构与界面微结构协同调控电子传输机制的认识，并实现了相关材料在能源转化、传感及储能等领域的功能拓展。项目团队在化学、材料类期刊发表高质量 SCI 论文 150 余篇，获授权发明专利 20 余件，培养博士、硕士研究生 20 余名。项目研发的紫精基分子材料已实现百公斤级中试生产，相关液流储能系统实现稳定运行，推动研究成果由基础研究向工程验证延伸。相关成果获得国内外同行广泛关注，丰富了紫精分子电子结构与界面电子传输调控的理论基础，为高效稳定功能界面的设计构筑及新型光电与储能体系的发展提供了科学依据。依托相关成果，提升了我国在紫精基功能材料与界面化学领域的国际学术影响力。基于上述贡献，提名该项目为陕西省自然科学奖一等奖。

三、项目简介

该项目属于物理化学领域中的胶体化学与界面化学学科。

功能界面化学通过在固-固、固-液异质界面精准调控电子传输及光、电、化学能转换，是能源转化、信息器件和化学制造等领域的重要物理化学基础。面向高效稳定功能界面的构筑，长期存在两类关键瓶颈：一是异质界面能级匹配与电子耦合难以协同调控，制约跨界面电子传输效率；二是依赖弱相互作用形成的界面取向无序、服役稳定性不足，难以兼顾高效传输与长期稳定。紫精具有可逆氧

化还原、强电子接受、结构可修饰和易界面组装等特点，是构筑分子电子传输层的理想平台，但常规紫精仍受共轭不足、能级调控范围有限、刚性衍生物合成困难及界面有序组装难等制约。

项目围绕“多层次结构对紫精基界面电子传输性能调控机制”关键科学问题，提出“重原子桥联紫精创制-界面有序组装-电子传输协同调控”的研究思路，形成了“分子创制-界面构筑-体系验证”的研究主线。主要科学发现如下：

(1) 创制重原子桥联紫精新结构，建立分子电子结构与氧化还原/电子转移性能的构效关系。率先将硫、硒、碲、铋、铊等重原子引入紫精骨架，通过刚性桥联锁定分子构象、增强电子离域与自旋轨道耦合，突破平面刚性共轭紫精衍生物合成瓶颈，实现能级、自由基稳定性及光电性质的定向调控。在此基础上发展主族元素桥联紫精聚合物、含硒紫精配位环及阳离子环蕃等多级结构，拓展了紫精基功能分子的结构空间。

(2) 发展紫精基界面有序组装方法，揭示“界面作用-分子取向-电子传输”构效规律。通过静电、氢键及共价作用调控紫精在异质界面的取向与耦合，提出双官能团锚定策略，实现分子面对面取向锁定与稳定组装，降低界面传输能垒并增强电子耦合，解决跨界面电子高效定向传输与结构稳定性难以兼顾的问题。含硒紫精环蕃及配位环体系进一步实现长寿命电荷分离和主客体诱导的定向电子流，验证了从分子结构到组装体再到异质界面的多层次调控机制。

(3) 阐明电极/电解质异质界面中电子转移与近界面物质运输的耦合调控机制，推动储能体系放大验证。围绕中性水系有机液流电池，阐明电极/电解质异质界面中电子传输与近界面物质运输的耦合关系，通过紫精基碳毡电极界面调控提升反应动力学、功率密度和能量效率；同时发展可规模化有机负极电解质合成路线，为体系工程放大提供材料基础。相关研究推动了紫精基功能界面化学由分子与机理研究向真实复杂体系拓展。

项目自实施以来，5 篇代表性论文均发表在国际著名化学类顶级期刊上。受邀在重要国际国内会议上作邀请报告 20 余次。美国科学院院士、麻省理工学院 Timothy Swager 教授，欧洲科学院院士、香港理工大学理学院院长黄维扬教授，北京大学深圳研究生院孟鸿教授，加拿大蒙特利尔大学 W. G. Skene 教授、华南师范大学兰亚乾教授、美国罗格斯大学 Frieder Jäkle 教授、新加坡南洋理工大学 Rei Kinjo 教授等国际著名化学家在国际权威期刊多次正面引用和评述相关研究成果。

研究成果对物理化学及材料化学具有重要意义，拓展了界面化学的研究内容，为物理化学、超分子化学和光电功能材料化学的发展做出了贡献。项目形成了从重原子桥联紫精分子创制、界面有序组装到功能体系验证的系统研究框架，为功能界面中能级匹配、电子定向传输及长期稳定的协同调控提供了新的分子化学路径。近年项目组围绕该课题发表 SCI 论文 150 余篇，包括化学类顶级期刊 *Angew. Chem. Int. Ed.* 15 篇、*J. Am. Chem. Soc.* 11 篇和 *CCS Chem.* 5 篇，获授权发明专利 20 余件。与浙江省嵊州市共建长三角新能源产教融合研究院（总经费 6000 万），

与中陕核（西安）中子科技有限公司共建中能创新技术研究院（总经费 1000 万元），产生了显著的社会经济效益。项目第一完成人入选国家人才计划青年项目，应邀担任 *National Science Review*、*Chinese Chemical Letters*、应用化学、*Aggregate*、物理化学学报、等杂志编委或青年编委，中国化学会青年工作委员会委员、中国化学会光化学委员会委员、西安交通大学青年教师工作委员会主任等职务。组建了清洁能源高效利用关键材料陕西省高校工程研究中心、陕西省新概念传感器及分子材料重点实验室、陕西省新型功能材料与器件创新引智基地并担任主任。项目成员中 1 人入选国家人才计划青年项目，2 人入选陕西省科协青年托举计划，1 人获博士后创新人才计划，1 人入选西安市科协青年托举计划，近五年共培养毕业博士及硕士研究生 20 余名。

四、客观评价

项目围绕紫精基功能界面的分子结构创制、界面有序组装及电子传输调控开展了持续研究，相关成果得到国内外同行在重要期刊、综述和专著中的公开评价。

（1）针对重原子桥联紫精分子设计及其光电性质的研究成果，南开大学陈军院士对此进行了大段地正面引用及积极评论（*Nat. Rev. Chem.* **2020**, *4*, 127）。新加坡国立大学 Kwok Wei Shah 教授在 *Polymers* 期刊上发表的论文对含此工作进行了大段地正面引用及积极评论，认为团队的工作“这些新材料展示了巨大的应用前景”（*Polymers* **2019**, *11*, 1839）。国家杰青、华南师范大学兰亚乾教授（*Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202212162）对本研究进行了引用并正面评述：“紫精衍生物单元作为一种独特的电子转移媒介，可以在光电系统中产生光热效应并呈现突出的电子转移能力，从而提高氧化还原催化体系的反应动力学和效率（*improve reaction kinetics and efficiency in redox catalytic systems.*）”。北京大学深圳研究生院孟鸿教授（*Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* **2023**, *251*, 112149）正面引用并强调本工作：“何等人将重原子引入到联吡啶中，得到的含铋紫精不仅展现出磷光性质，而且作为有前景的光催化剂和电子媒介（*promising photocatalyst and an electron mediator*），在交叉脱氢偶联反应中也能有效发挥作用”。印度卡伦扬技术与科学学院 George Rajendra Kumar 教授在（*J. Organomet. Chem.* **2023**, *1001*, 122849）发表综述性文章，配图引用并强调：“本研究通过重原子铋与紫精结合促进了系间窜越，因此新的含铋紫精表现出高效的磷光发射现象，同时相比于其他无重元素的氮族紫精，含铋紫精表现出电致磷光变色性质”。

（2）针对紫精基界面组装及光催化电子传输调控的研究成果，中南大学黄健涵教授（*Angew. Chem. Int. Ed.* **2026**, *65*, e3751232）对本工作进行了正面引述并加以借鉴“紫精衍生物会优先接受单电子从而转化为单阳离子自由基态(RV+•)，阳离子和自由基的共存通过对单重态(S₁)和三重态(T₁)的潜在利用，可同时实现电子和能量转移过程”。美国科学院院士、麻省理工学院 Timothy Swager 教授在（*Synfacts* **2022**, *18*, 0502）发表重要评述：“作者利用空间共轭作用发展了一类具有延迟电荷重组（*delayed charge recombination*）的邻苯基空间共轭紫精(o-TPV²⁺)，其寿命是苯基紫精的 8 倍；由于 o-TPV²⁺较长的激发态寿命（*longer-lived excited-*

state lifetime), 作者利用其作为光催化剂高效实现了苯胺的氧化偶联, 此外, 作者还证明了 $g\text{-C}_3\text{N}_4/o\text{-TPV}^{2+}$ 复合材料在光催化水分解制氢方面非常稳定和高效”。土耳其塞尔库克大学 Imren Hatay Patir 教授 (*ACS Appl. Nano Mater.* **2023**, *6*, 20173) 引用本工作并评价: “它们可以在温和的反应条件下工作, 与多种光敏剂、光催化剂、析氢催化剂兼容, 并通过**减少电荷复合和增加光激发态物质寿命**来提高光催化效率 (*as well as increasing photocatalytic efficiency by reducing charge recombination and increasing the lifetime of light-excited species*)”。国家杰青、大连理工大学段春迎教授 (*Chem. Commun.* **2023**, *59*, 8456) 对本研究进行引用并作出积极评价: “在工业应用中, 实现有机分子的选择性光驱动氧化反应与氢释放是非常令人期待的 (*...achieving a selective light-driven oxidation...is highly desirable in industrial applications*)”。苏州大学苏远停副教授 (*Chem. Sci.* **2023**, *14*, 3548) 对本工作进行了正面引用并评价到: “构建具有**双自由基中性态**的紫精分子是极具挑战性的且非常重要的,何等人报道了紫精双自由基中性态的强灵敏度荧光和高效的光催化氧化偶联反应”。

(3) 针对水系有机液流电池材料与界面调控的成果, 美国化学会、电化学学会、电分析化学学会和材料研究学会成员 Keith J. Stevenson 教授评论: “联吡啶中引入 π -共轭基团有利于**降低氧化还原电位**, ...呋喃紫精电位低至-0.59 V 和-0.81 V vs. SHE” (*Electrochimica Acta* **2023**, *461*, 14267)。国家发明家学院 (NAI)、材料研究学会 (MRS)、美国科学促进会 (AAAS)、PMSE、Kavli、RSC 会士, 美国化学会创意发明奖获得者 Antonio Facchetti 对本研究利用紫外可见吸收光谱技术测试溶解度的方法给予肯定并引用 (*J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 758)。CECRI 首席科学家 Pitchai Ragupathy 教授正面评价液流电池工作: “这些 π -共轭的杂环基团降低了还原电位, 提高了紫精自由基的稳定性, 减小了带隙, 增强了溶解度, 可作为单电子和双电子存储系统发挥作用” (*Energy & Fuel*, **2023**, *37*, 18226)。瑞典林雪平大学 Mikhail Vagin 教授认为这一体系具有**优异的两电子储能能力**, 在高容量储能应用中展现出**突出潜力** (*Adv. Sci.* **2026**, *13*, e74945)。代表作中商业化导向的紫精及萘二酰亚胺负极电解质实现高水溶性、百克级低成本制备及长时循环, 为中性水系有机液流电池规模化提供了重要材料依据。

项目相关研究曾获陕西高等学校科学技术研究优秀成果奖一等奖等奖励; 项目负责人获陕西省青年科技奖、RSC Applied Interfaces 青年科学家奖等。总体而言, 国内外公开评价表明, 本项目在重原子桥联紫精结构创制、自由基/电荷分离调控、界面有序组装以及储能体系界面过程研究方面具有较好的原创性、公认度和科学价值。

五、代表性论文专著目录（不超过 8 条，其中代表性论文不超过 5 篇，代表性专著不超过 3 部）

序号	论文专著名称	刊名	作者	年卷页码 (xx 年 xx 卷 xx 页)	发表时间	通讯作者	第一作者	国内作者	他引总次数	检索数据库	知识产权是否归国内所有
1	Electrochromic Poly(chalcogenoviologen)s as Anode Materials for High-Performance Organic Radical Lithium-Ion Batteries	Angew. Chem. Int. Ed.	Guoping Li; Bingjie Zhang; Jianwei Wang; Hongyang Zhao; Wenqiang Ma; Letian Xu; Weidong Zhang; Kun Zhou; Yaping Du; Gang He	2019 年 58 卷 8468-8473 页	2019 年 4 月 5 日	Gang He	Guoping Li; Bingjie Zhang	李国平、张冰洁、王建伟、赵洪洋、马文强、许乐天、张维东、周琨、杜亚平、何刚	138	SCI	是
2	Phosphorescent Bismoviologens for Electrophosphorochromism and Visible Light-Induced Cross-Dehydrogenative Coupling	J. Am. Chem. Soc.	Wenqiang Ma; Letian Xu; Sikun Zhang; Guoping Li; Tianyu Ma; Bin Rao; Mingming Zhang; Gang He	2021 年 143 卷 1590-1597 页	2021 年 1 月 4 日	Gang He	Wenqiang Ma	马文强、许乐天、张思坤、李国平、马天宇、饶彬、张明明、何刚	53	SCI	是

3	Selenoviologen-Appendant Metallacycles with Highly Stable Radical Cations and Long-Lived Charge Separation States for Electrochromism and Photocatalysis	Angew. Chem. Int. Ed.	Sikun Zhang; Lingzhi Ma; Wenqiang Ma; Long Chen; Kai Gao; Shi Yu; Mingming Zhang; Lei Zhang; Gang He	2022 年 6 月 26 日 61 卷 e202209 054 页	2022 年 6 月 26 日	Gang He	Sikun Zhang	张思坤、马凌志、马文强、陈龙、高凯、于世、张明明、张雷、何刚	44	SCI	是
4	The Green Box: Selenoviologen-Based Tetracationic Cyclophane for Electrochromism, Host-Guest Interactions, and Visible-Light Photocatalysis	J. Am. Chem. Soc.	Yawen Li; Naiyao Li; Guoping Li; Yi Qiao; Mingming Zhang; Lei Zhang; Qing-Hui Guo; Gang He	2023 年 4 月 4 日 145 卷 9118-9128 页	2023 年 4 月 4 日	Gang He	Yawen Li	李亚雯、李乃垚、李国平、乔易、张明明、张雷、郭庆辉、何刚	39	SCI	是

5	Commercializable Naphthalene Diimide Anolytes for Neutral Aqueous Organic Redox Flow Batteries	Angew. Chem. Int. Ed.	Xu Liu; Heng Zhang; Chenjing Liu; Zengrong Wang; Xuri Zhang; Haiyan Yu; Yujie Zhao; Ming-Jia Li; Yinshi Li; Ya-Ling He; Gang He	2024 年 63 卷 e202405 427 页	2024 年 4 月 11 日	Gang He	Xu Liu; Heng Zhang	刘旭、张恒、 刘晨晶、王增 榕、张旭日、 喻海燕、赵玉 婕、李明佳、 李印实、何雅 玲、何刚	34	SCI	是
合 计									308		

六、主要完成人情况（不超过 6 人）

姓名	排名	行政职务	技术职称	工作单位	完成单位	对本项目贡献
何刚	1	科研副院长	教授	西安交通大学	西安交通大学	项目总负责，提出了本成果的主要研究思路和研究方法，设计了研究内容和实验方案，并具体指导和完成了一系列创新实验，获得了重要的研究成果。是创新点 1、2、3 的核心贡献者，是本项目的主要研究者，参与本项目研究工作占本人全部工作量的 80%，代表性论文 1、2、3、4、5。
李国平	2	无	副教授	西安交通大学	西安交通大学	项目主要成员，是创新点 1 和 2 的核心贡献者，是紫精分子及其界面组装的主要研究者，参与本项目研究的工作量占本人全部工作量的 70%，代表性论文 1、2、4。
李亚雯	3	无	副教授	西安交通大学	西安交通大学	项目主要成员，是创新点 2 的核心贡献者，是紫精环蕃界面组装的主要研究者，参与本项目研究的工作量占本人全部工作量的 70%，代表性论文 4。
马文强	4	无	讲师	西安交通大学	西安交通大学	项目主要成员，是创新点 1 和 2 的核

						心贡献者，是紫精类光电功能表界面体系及应用的主要研究者，参与本项目研究的工作量占本人全部工作量的70%，代表性论文1、2、3。
刘旭	5	无	讲师	西安交通大学	西安交通大学	项目主要成员，是创新点1的核心贡献者，是紫精类分子的主要研究者，参与本项目研究的工作量占本人全部工作量的70%，代表性论文5。
周琨	6	无	副教授	西安交通大学	西安交通大学	项目主要成员，是创新点1的核心贡献者，是紫精类分子的主要研究者，参与本项目研究的工作量占本人全部工作量的70%，代表性论文1。

七、主要完成单位情况（不超过 3 个）

完成单位	排名	对本项目主要贡献（限 600 字）
西安交通大学	1	西安交通大学是项目早期孕育、研究，乃至后期应用推进工作的依托单位，项目成员均是西安交通大学全职雇员，长期在学校工作。学校为项目团队提供了良好的工作条件，为本项目的顺利进行提供了坚实的保障。

八、完成人合作关系说明

本项目主要完成人何刚、李国平、李亚雯、马文强、刘旭、周琨长期围绕紫精基功能界面化学开展合作研究，针对紫精分子电子结构调控、界面有序组装与电子传输等关键科学问题，逐步形成了“重原子桥联紫精分子创制—界面有序组装—电子传输调控—功能体系验证”的系统研究主线。

何刚作为项目第一完成人和研究团队负责人，长期负责相关研究方向的总体设计与组织实施，是本项目三个主要科学发现的核心贡献者。李国平主要围绕含硫族元素紫精分子设计、重原子桥联结构创制及界面电子传输开展研究，与何刚合作完成含硫族元素紫精等系列工作；马文强主要参与重原子桥联紫精结构及光电性质研究，与何刚、李国平等合作开展含硫族元素紫精和铋桥联紫精研究；周琨参与早期含硫族元素紫精及其储能性能研究。代表性论文 1 由何刚任通讯作者，李国平为共同第一作者，马文强、周琨共同参与；代表性论文 2 由何刚任通讯作者、马文强为第一作者，李国平共同参与，形成了本项目在重原子桥联紫精结构创制与电子结构调控方面的重要研究基础。

在此基础上，项目进一步由分子结构调控拓展至紫精基界面有序组装与电子传输研究。马文强参与含硒紫精配位环研究，通过配位驱动的层级组装实现自由基稳定和长寿命电荷分离；李亚雯主要开展含硒紫精环蕃构筑、主客体组装及光诱导电子传输研究，与何刚、李国平合作完成紫精环蕃及其界面组装系列工作。相关研究逐步揭示了分子结构—组装方式—电荷分离与电子传输之间的内在联系，为本项目界面有序组装及定向电子传输科学发现提供了重要支撑。

刘旭主要围绕水系有机液流电池电解质材料及界面过程开展研究，与何刚等合作发展了可规模化制备的有机负极电解质，实现高水溶性、低成本制备和长时稳定循环，推动项目研究由分子与界面机制向储能功能体系拓展。代表性论文 5 由何刚任通讯作者、刘旭为共同第一作者，是本项目储能体系界面调控与功能验证的重要成果。

综上，六位完成人围绕紫精基界面化学形成了长期、连续且相互衔接的合作关系，研究内容由重原子桥联紫精分子创制逐步拓展至界面有序组装、定向电子传输及储能体系验证。各完成人在不同研究阶段发挥了重要作用，共同支撑了本项目主要科学发现的形成。