

陕西省自然科学奖公示信息

(2025年度)

一、项目基本情况

| | |
|--------|-----------------|
| 项目名称 | 晶态多孔材料的创制及其应用研究 |
| 主要完成人 | 杨庆远； 王少敏 |
| 主要完成单位 | 西安交通大学 |

二、提名意见（适用于部门、机构提名）

| | | | |
|--|--------|------|---|
| 提 名 者 | 陕西省教育厅 | 提名等级 | <input type="checkbox"/> 一等奖 <input checked="" type="checkbox"/> 二等奖及以上 |
| <p>本项目属于化学化工领域，曾获国家自然科学基金、国家重点研发计划等多项国家级项目支持。在“双碳”战略持续深化的背景下，开发高效低耗的气体分离技术对推动能源结构转型、助力实现碳中和目标具有重大意义。当前，在煤层气提纯、烯烃/烷烃分离、温室气体减排等重点方向，传统技术仍面临显著瓶颈，亟需从材料与工艺层面突破现有技术局限，发展新型吸附体系与先进分离工艺，以满足国家战略与行业发展的迫切需求。该项目突破了气体分离领域长期存在的“trade-off”效应制约，成功研制出兼具高选择性与高吸附容量的微孔 MOF 材料；首创富电子增强策略，通过芳香配体构建富电子富集孔道，显著提升了对烷烃类气体的吸附容量与分离选择性；揭示溶剂效应对 MOF 拓扑结构的调控机制，实现了多种拓扑结构的可控合成，极大拓展了该类材料在气体分离中的应用潜力。已发表 SCI 论文 30 余篇，其中包括 Angew. Chem. Int. Ed., JACS 等国际权威期刊；申请国家发明专利 10 余项，获得陕西高等学校科学技术研究优秀成果一等奖。所开发的材料与技术为工业气体分离提供了全新解决方案，有效突破传统技术瓶颈，相关成果已在合作企业开展应用示范，经济效益与社会效益显著。经审查，该项目申报材料齐全、规范，不存在知识产权争议，完成人排序无异议，符合陕西省自然科学奖提名条件。</p> <p>说明：省科学技术奖一、二等奖项目，实行按等级标准提名、独立评审表决的机制。提名单者应严格依据省科学技术奖的标准条件，说明提名项目的贡献程度及等级建议。“仅提名一等奖”评审落选项目不再降格参评二等奖。提名项目正式提交后，提名等级建议本年度不得变更。</p> | | | |

二、提名意见（适用于专家提名）

| | | | |
|--|--|------|--|
| 姓 名 | | | |
| 专家类型 | <input type="checkbox"/> 国家最高科学技术奖获得者 <input type="checkbox"/> 中国科学院院士 <input type="checkbox"/> 中国工程院院士 <input type="checkbox"/> 国家科学技术奖获奖项目第一完成人（需注明获奖等次） <input type="checkbox"/> 省最高科学技术奖获奖人（或 xxxx 年省科学技术最高成就奖、xxxx 年基础研究重大贡献奖获奖人） <input type="checkbox"/> Xxxx 年省科学技术奖第一完成人（需注明获奖等次） | 提名等级 | <input type="checkbox"/> 一等奖 <input type="checkbox"/> 二等奖及以上 |
| 责任专家 | <input type="checkbox"/> 是 <input type="checkbox"/> 否 | | |
| 提名意见： | | | |
| <p style="text-align: center;">说明：省科学技术奖一、二等奖项目，实行按等级标准提名、独立评审表决的机制。提名单者应严格依据省科学技术奖的标准条件，说明提名项目的贡献程度及等级建议。“仅提名一等奖”评审落选项目不再降格参评二等奖。提名项目正式提交后，提名等级建议本年度不得变更。</p> | | | |

三、项目简介

(限 2 页)

随着全球半导体产业快速发展和“双碳”战略深入推进，氟化气体（F-gases）回收与工业气体分离成为亟待解决的关键技术难题。氟化气体作为半导体制造不可或缺的电子特气，在晶圆切割、等离子刻蚀等环节大量使用但利用率低，且其极高的全球变暖潜能值对环境构成严重威胁。传统低温精馏等回收方法能耗巨大、成本高昂。同时，石化工业中乙烯/乙烷分离、天然气提纯等过程因气体分子物理性质相似而面临巨大挑战。活性炭等传统多孔材料由于结构单一、孔道可设计性差、比表面积较低，往往较难实现高效的气体存储、分离和转化。基于此，申请人面向国家能源化工领域的重大需求，围绕新型多孔框架材料的构筑及功能调控，从“分子识别机理—材料应用探索”层面上开展了系统研究。金属-有机框架材料（MOFs）虽具有结构可调控优势，但如何精准设计实现超高选择性分离并突破吸附容量与选择性的制约关系，以及实现工业化应用，是当前多孔材料领域的重大科学问题。

本项目通过精密孔结构调控和孔化学设计，成功构建了系列新型 MOF 吸附剂，在多个关键气体分离体系中取得国际领先性能，为电子特气纯化、能源提纯和温室气体减排提供了创新材料解决方案。

二、主要科学发现与创新点

本项目围绕高性能 MOF 材料在电子特气纯化、温室气体捕获和关键工业气体分离中的应用，取得了以下原创性科学发现和突出创新：

1. 创建精准孔结构与孔化学协同调控新策略

基于对目标气体分子尺寸和电子性质的深入理解，本项目发展了“精准孔结构与孔化学协同调控”创新策略。通过配体设计、溶剂效应和功能团引入，实现 MOF 材料孔径在 4.7-12 Å 范围的精确控制。针对 SF₆ 分子（动力学直径 0.52 nm），设计合成了具有 0.6 nm 最佳孔径的 Ni(ina)₂ 吸附剂，通过“笼中捕获”效应实现 SF₆ 的近乎完美捕获。通过引入氨基功能团，NH₂-Ni-MOF 对 CF₄/N₂ 选择性达到创纪录的 46.3，成功突破了吸附容量与选择性之间的“trade-off”效应。

2. 揭示多组分气体高效分离微观机制

综合运用 GCMC 模拟、DFT 计算和原位单晶结构解析等先进手段，系统阐明了 MOF 材料对 F-gases、CH₄、C₂H₆、C₂H₄ 等气体高效分离的微观机制。首次揭示了范德华力、静电相互作用、客体分子极化率等关键因素，以及孔壁功能团与气体分子间的 C-H... π 相互作用和 O...H 氢键在精准分离中的作用机制，为新型高性能分离材料设计提供了理论指导。。

3. 在多项关键气体分离体系中创造了国际领先乃至世界纪录的性能指标：

本项目在多个重要气体分离体系中实现了性能的全面突破，树立了新的行业标杆。在电子特气纯化领域，Ni(ina)₂对 SF₆/N₂ 选择性高达 375.1，同时在 0.1 bar 和 298K 下 SF₆ 吸附容量达 53.5 cm³/g，均为世界最高水平；NH₂-Ni-MOF 对 CF₄/N₂ 选择性达到创纪录的 46.3，超越所有已知基准吸附剂。在天然气升级方面，Cu-MOF 在环境条件下丙烷吸附容量高达 134.0 cm³/g，对 C₃H₈/CH₄ 和 C₂H₆/CH₄ 选择性分别达 204 和 9；Ni(ina)₂对 CH₄/N₂ 选择性 15.8，CH₄ 吸附容量 40.8 cm³/g，刷新所有已报道材料基准；Ni(3-ain)₂的 CH₄ 吸附容量 46.7 cm³/g，为已报道第二高值。在碳捕集领域，Ni(3-ain)₂对 CO₂ 吸附容量达 3.73 mmol/g，CO₂/N₂ 和 CO₂/CO 选择性分别为 26.3 和 19.2，为碳捕集技术推广应用提供了高性能材料支撑。。

4. 突破 MOF 材料工业化应用瓶颈

首次成功开发超微孔 MOF 材料 Ni(3-ain)₂ 粉末颗粒化成型方法，在保持晶体结构和吸附性能基础上，通过引入 PVB 粘合剂，颗粒化材料对 CO₂/N₂ 和 CO₂/CO 选择性分别提升至 38.5 和 43.7，打破"成型后性能必然下降"的传统认知。所开发材料均表现出优异的热稳定性、湿度稳定性和循环利用性能。Ni(ina)₂ 已实现低成本公斤级放大生产（约 25 美元/公斤），展现巨大产业化潜力。

三、项目成果与影响

本项目在精准调控 MOF 材料孔结构与孔化学、揭示气体分离微观机制、创造多项破纪录的性能、突破工业化应用瓶颈等方面取得重大突破，为解决半导体产业 F-气体回收、天然气提纯、碳捕集等关键技术难题提供了创新材料解决方案，对推动我国在高端电子材料、清洁能源和碳中和领域的技术进步具有重要意义。

四、客观评价

【限 2 页。围绕科学发现点的原创性、公认度和科学价值进行客观、真实、准确评价。填写的评价内容要有客观依据，主要包括国内外同行在重要学术刊物（专著）和重要国际学术会议等公开发表的学术性评价意见，国内外重要科技奖励等，可在附件中提供证明材料。非公开资料（如私人信函等）不能作为评价依据。】

该项目成果得到了中、美、法、英等 30 多个国家/地区 200 余位同行专家正面引用或高度评价，其中 5 篇代表性论文在 Web of Science 数据库中被他引 200 次，获得陕西高等学校科学技术研究优秀成果一等奖。

1. 针对甲烷/氮气分离的研究成果，中山大学陈小明院士在期刊《Materials Chemistry Frontiers》的综述文章中，高度评价我们的研究发现了一类低成本且具有最高 CH_4/N_2 分离比的多孔材料（*Yang et al. studied four nickel-based coordination networks with functional sites (-NH₂) or varied pore sizes for the separation of CH₄/N₂, which supports that the pore size and chemical environment of adsorbents play an important role during methane purification*），充分肯定了其在甲烷提纯领域的卓越性能。同时，国家杰青、北京工业大学李建荣教授在《Chemical Society Reviews》上发表的评论文章中，配图展示我们工作，特别指出我们的 $\text{Ni}(\text{ina})_2$ 材料展现出良好的甲烷吸附性能和较高的 CH_4/N_2 分离性能（*Among them, Ni(ina)₂ and Ni(3-ain)₂ exhibited excellent adsorption for CH₄. The IAST selectivity of Ni(ina)₂ for CH₄/N₂ (50:50) is the highest among the reported MOF materials (15.8) (Fig. 5b)*），并具备优异的稳定性，为其在工业应用中的可行性提供了有力佐证。

2. 针对六氟化硫提纯的研究成果，欧洲科学院院士、福建师范大学的陈邦林教授，在他的《Science China Chemistry》综述文章中报道，我们所开发的微孔材料孔径非常接近 SF_6 的分子大小（*Recently, Yang et al. [171] studied the capture of greenhouse gas SF₆ performance using three MOFs,, and Ni(ina)₂ with fine-tuning pore structures. Among them, Ni(ina)₂ has perfect pore size (6 Å) that is close to the kinetic diameter of SF₆ (5.2 Å), affording a high binding affinity. Ni(ina)₂ showed excellent SF₆ adsorption capacity (5.3 mmol g⁻¹ at 298 K and 0.1 bar) and the highest SF₆/N₂ selectivity (375.1)*），因此对 SF_6 具有高度的结合亲和力，并且有较高的吸附量。这表明我们的材料在捕获和分离温室气体 SF_6 方面表现出卓越的性能。国家杰青、浙江大学教授鲍宗必教授在《Science Advance》的研究论文中指出了我们报道的 SF_6 分子与材料骨架之间存在着主客体相

相互作用 (*The polarization between the electron-rich fluorine atoms of the guest molecule and the hydrogen atom of the benzene ring illustrates a strong host-guest binding interaction (61, 62)*), 这一发现为理解和优化气体吸附机制提供了重要依据。中科院院士、浙江大学任其龙院士在其《Nature Communications》的研究工作中, 在 298 K 与 100 kPa 条件下系统比较了多种多孔材料用于 SF₆/N₂ 分离的性能, 报道 Al(fum) 的 IAST 选择性高达 50139, 显著高于此前基准 Ni(adc)(dabco)_{0.5} (948) 以及其他顶尖文献材料 Ni(NDC)(TED)_{0.5} (750) 和我们提出的 Ni(ina)₂ (375); 该独立评价将 Ni(ina)₂ 纳入国际公认的高性能参照体系。

3. 针对天然气提纯的研究成果, 韩国蔚山科学技术学院的 Hyunchul OH 教授在其《Coordination Chemistry Reviews》综述中配图展示我们的工作, 并评论我们的材料在分离甲烷 (CH₄) 和高级碳氢化合物方面表现出卓越的性能 (*To show the effectiveness of separation of CH₄ from higher hydrocarbons, one of the Cu-MOF showed excellent separation capacity. Under ambient conditions, the adsorption isotherms revealed a significant uptake for C₃H₈ (134.0 cm³ g⁻¹), with outstanding selectivity of 9 and 204 for C₂H₆/CH₄ and C₃H₈/CH₄, respectively.*)。

4. 针对四氟化碳和三氟化氮的研究成果, 美国纽约州罗切斯特市罗切斯特大学 Brandon R. Barnett 教授在其《Chemical Science》的研究工作中指出 Ni(ina)₂ 和 Ni(3-ain)₂ 展示了目前针对该混合气体 (10:90 CF₄:N₂, 298 K, 1 bar) 公开报道的最高选择性 (分别为 46.3 和 34.7) (*For instance, Ni(ina)₂ (ina = isonicotinate) and Ni(3-ain)₂ (3-ain = 3-aminoisonicotinate) display the largest selectivities reported for this mixture (46.3 and 34.7, respectively, for 10:90 CF₄:N₂ at 298 K and 1 bar).*³³)。

5. 针对溶剂调控 MOF 拓扑结构的文章, 国家杰青、北京工业大学李建荣教授在其《Separation and Purification Technology》的研究工作中评价我们所制备的 Co-1-ina 材料是用于乙烷/乙烯分离的最佳性能材料之一 (*For example, the Q_{st} value of C₂H₆ was lower than several top-performing C₂H₆-selective MOFs (Table S3), such as Fe₂(O₂)(dobdc) (66.8 kJ mol⁻¹) [10], IRMOF-8 (52.5 kJ mol⁻¹) [33], Co-1-ina (32.9 kJ mol⁻¹) [34]*)。

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 | Nickel-Based Metal-Organic Frameworks for Coal-Bed Methane Purification with Record | Angewandte Chemie International Edition | Shao-Min Wang ⁺ , Mohana Shivanna ⁺ , and Qing-Yuan Yang* | 2022 年 61 卷 e2021017 页 | 2022 年 2 月 8 日 | Qing-Yuan Yang | Shao-Min Wang ⁺ , Mohana | 王少敏, 杨庆远 | 69 | Web of science | |
| 2 | Pore-Structure Control in Metal-Organic Frameworks (MOFs) for Capture of the Greenhouse Gas SF ₆ with Record Separation | Angewandte Chemie International Edition | Shao-Min Wang, Xuan-Tong Mu, Hao-Ran Liu, Su-Tao Zheng, and Qing-Yuan Yang* | 2022 年 61 卷 e202107066 页 | 2022 年 6 月 8 日 | Qing-Yuan Yang | Shao-Min Wang | 王少敏, 穆玄童, 刘浩然, 郑宿 | 90 | Web of science | 是 |
| 3 | Amino-functionalized microporous MOFs for greenhouse gases CF ₄ and NF ₃ capture with record selectivity | ACS Applied Materials & Interfaces | Shao-Min Wang, Hao-Ling Lan, Guo-Wei Guan, and Qing-Yuan Yang* | 2022 年 14 卷 40072 页 | 2022 年 8 月 24 日 | Qing-Yuan Yang | Shao-Min Wang | 王少敏, 兰昊灵, 管国伟, 杨 | 38 | Web of science | 是 |

| | | | | | | | | | | | |
|-------------|---|--|---|------------------------|-------------------|----------------|---------------|------------------|----|----------------|---|
| 4 | A Copper-Base d Metal-Organic Framework for Upgrading Natural Gas through the | Green Chemical Engineering | Shao-Min Wang, Qing-Yuan Yang * | 2023 年 4 卷 81 页 | 202 2 年 5 月 3 日 | Qing-Yuan Yang | Shao-Min Wang | 王少敏, 杨庆远 | 16 | Web of science | 是 |
| 5 | Control of pore structure by the solvent effect for efficient ethane/ethylene separation, | Separation and Purification Technology | Shao-Min Wang a, Hao-Ran Liu a, Su-Tao Zheng a, Hao-Ling Lan a, Qing-Yuan Yang a,* , Yan-Zhen | 2023 年 304 卷 1223 78 页 | 202 2 年 10 月 18 日 | Qing-Yuan Yang | Shao-Min Wang | 王少敏, 刘浩然, 郑宿涛, 兰 | 13 | Web of science | 是 |
| 合 计 | | | | | | | | | | | |
| 补充说明（视情填写）： | | | | | | | | | | | |

六、主要完成人情况表

| | | | |
|--|--------|-----|---|
| 姓 名 | 杨庆远 | 排 名 | 1 |
| 行政职务 | 无 | | |
| 技术职称 | 教授 | | |
| 工作单位 | 西安交通大学 | | |
| 完成单位 | 西安交通大学 | | |
| 对本项目主要学术贡献：系统性地设计了这项研究并阐明了吸附分离的微观机理。他领导团队利用理论计算(GCMC 模拟和 DFT 计算)和实验分析(单晶 X 射线衍射),深入揭示了 Ni(ina)2 和 Ni(3-ain)2 能与甲烷分子产生强相互作用的原因 。这项工作不仅为高效分离提供了高性能材料,也为未来设计具有特定分离功能的 MOF 提供了重要的理论指导。是 5 篇代表性论文的通讯作者。 | | | |

| | | | |
|--|--------|-----|---|
| 姓 名 | 王少敏 | 排 名 | 2 |
| 行政职务 | 无 | | |
| 技术职称 | 助理教授 | | |
| 工作单位 | 西安交通大学 | | |
| 完成单位 | 西安交通大学 | | |
| 对本项目主要学术贡献：项目主要成员，是创新点 1 和 2 的核心贡献者，是晶态多孔材料的制备及其应用研究的主要研究者，参与本项目研究的工作量占本人全部工作量的 70%。 | | | |

七、主要完成单位情况表

| | |
|--|--------|
| 单位名称 | 西安交通大学 |
| <p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>西安交通大学作为本项目从早期孕育、核心研究到后期应用转化与落地推进的依托单位，深度参与了项目全生命周期的关键环节。项目负责人杨庆远教授是西安交通大学全职在岗教师，长期在学校工作。为保障项目顺利开展，西安交通大学为团队提供了全方位的优质条件，涵盖项目经费管理、产学研对接协调、学术交流合作等环节，形成了从硬件到软件的全方位保障体系，有效助力项目突破关键技术瓶颈。</p> | |

| | |
|--------------------|--|
| 单位名称 | |
| <p>对本项目主要学术贡献：</p> | |

完成人合作关系说明

- 1.第一完成人杨庆远在 2019-2025 年期间，与第二完成人王少敏合作开展研究，共同发表科研论文 13 篇。
- 2.第二完成人王少敏在 2019-2025 年期间，与第一完成人杨庆远合作开展研究，共同发表科研论文 13 篇。

完成人合作关系情况汇总表

| 序号 | 合作方式 | 合作者/项目排名 | 合作时间 | 合作成果 | 证明材料 |
|----|------|---------------|------------|--|------|
| 1 | 论文合著 | 王少敏、杨庆远/第二、第一 | 2019-2025年 | Pore-Structure Control in Metal–Organic Frameworks (MOFs) for Capture of the Greenhouse Gas SF ₆ with Record Separation. | |
| 2 | 论文合著 | 王少敏、杨庆远/第二、第一 | 2019-2025年 | Nickel-Based Metal-Organic Frameworks for Coal-Bed Methane Purification with Record CH ₄ /N ₂ Selectivity. | |
| 3 | 论文合著 | 王少敏、杨庆远/第二、第一 | 2019-2025年 | Amino-functionalized microporous MOFs for greenhouse gases CF ₄ and NF ₃ capture with record selectivity | |
| 4 | 论文合著 | 王少敏、杨庆远/第二、第一 | 2019-2025年 | A Copper-Based Metal-Organic Framework for Upgrading Natural Gas through the Recovery of C ₂ H ₆ and C ₃ H ₈ , | |
| 5 | 论文合著 | 王少敏、杨庆远/第二、第一 | 2019-2025年 | Control of pore structure by the solvent effect for efficient ethane/ethylene separation, | |
| 6 | 论文合著 | 王少敏、杨庆远/第二、第一 | 2019-2025年 | A structured ultramicroporous metal-organic framework for carbon dioxide capture, | |

| | | | | | |
|--------|------|---------------|------------|--|--|
| 7 | 论文合著 | 王少敏、杨庆远/第二、第一 | 2019-2025年 | Ethane/ethylene separations in flexible diamondoid coordination networks via an ethane-induced gate-opening mechanism | |
| 8 | 论文合著 | 王少敏、杨庆远/第二、第一 | 2019-2025年 | Rational Design of a π -Electron Rich Co-MOF Enabling Benchmark C ₂ H ₆ /CH ₄ Selectivity in Natural Gas Purification | |
| (不限条目) | | | | | |