

### 附件 3

自然科学奖推荐号：120-226

<b>项目名称</b>	一维链状半导体材料生长机理和光伏器件研究
<b>提名单位</b>	河北省教育厅
<b>项目简介</b>	<p>该项目属于“材料科学”学科中的“无机非金属材料”领域。半导体材料是半导体制造的基石，材料创新是突破半导体器件性能和发展新型器件的关键。《中国制造 2025》中明确将新材料列为重点发展项目。传统的半导体材料，包括硅、锗、III-V 族、II-VI 族化合物半导体等，具有对称性较强的三维晶体结构，在电子性质、物理化学性质等方面呈现出各向同性。一维链状半导体材料则在两个方向上通过较弱的范德华力相结合，在缺陷性质、光电子性质等方面出较强的各项异性，展现出与传统半导体材料不同的特性。并且，传统的半导体生长和缺陷理论不再适用一维链状半导体材料。</p> <p>申请团队围绕一维链状半导体材料的可控生长、缺陷性质研究和调控以及新型光伏器件构筑展开了研究。取得的创新性成果和主要科学发现有：</p> <p>一、材料生长方面，发现了界面缺陷诱导一维链状半导体直立生长的新机制，建立了一维链状半导体有序阵列的“劈裂生长”通用理论模型，解决了一维链状硒化锑垂直生长的科学难题和技术挑战。</p> <p>二、本征点缺陷性质研究和调控方面，揭示了硒化锑、硫化锑、硫硒化锑等一维链状半导体中深能级缺陷性质与组分、结构、生长环境的依赖关系；提出了原位缺陷钝化创新思想，实现了硒化锑薄膜生长过程中缺陷密度和强择优取向生长的协同调控。</p> <p>三、光伏器件构筑和效率进展方面，构建了基于一维链状硒化锑纳米阵列光吸收层的径向异质结太阳能电池结构，通过界面工程和制备工艺优化，先后三次报道了此类太阳能电池光电转换效率最高值。</p> <p>五篇代表性论文分别发表在 Nature Communications, Advanced Energy Materials, Advanced Science, Solar Energy Materials and Solar Cells 和 Applied Physics Express (含 ESI 热点论文 1 篇，高被引论文 2 篇，2019 年中国百篇最具影响国际学术论文 1 篇，英国物理学会 IOP 2019 中国高被引作者奖一项)。5 篇代表性论文被 WOS 引用 791 次(他引 78 次)，其中单篇最高引用 432 次(他引 417 次)。相关研究成果被收录到 Emerging inorganic solar cell efficiency tables、德国埃尔朗根-纽伦堡大学 Christoph J. Brabec 教授等人整理的 Device performance of emerging photovoltaic materials、以及荷兰原子和分子物理学研究所(AMOLF)的 S-Q Charts 太阳能电池最高效率纪录表中。</p> <p>申请团队获得国家重点研发计划、国家自然科学基金、河北省自然科学基金等项目资助。项目第一完成人荣获河北省杰出青年基金项目资助(2019 年)。项目组成员荣获“中国侨界贡献奖”(2018)，河北省“巨人计划创</p>

新团队”领军人才等。

### 代表性论文专著目录

1. Zhiqiang Li<sup>#\*</sup>, Xiaoyang Liang<sup>#</sup>, Gang Li<sup>#</sup>, Haixu Liu, Huiyu Zhang, Jianxin Guo, Jingwei Chen, Kai Shen, Xingyuan San, Wei Yu, Ruud E.I. Schropp & Yaohua Mai<sup>\*</sup>. 9.2%-efficient core-shell structured antimony selenide nanorod array solar cells. Nature Communications; 2019, 10: 125.
2. Xiaomin Wang, Rongfeng Tang, Chenhui Jiang, Weitao Lian, Huanxin Ju, Guoshun Jiang, Zhiqiang Li, Changfei Zhu, and Tao Chen<sup>\*</sup>. Manipulating the Electrical Properties of Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> Film for High-Efficiency Solar Cell. Advanced Energy Materials 2020, 10: 2002341.
3. Kai Shen,<sup>\*</sup> Yu Zhang, Xiaoqing Wang, Chizhu Ou, Fei Guo, Hongbing Zhu, Cong Liu, Yanyan Gao, Ruud E. I. Schropp, Zhiqiang Li, Xianhu Liu, and Yaohua Mai<sup>\*</sup>. Efficient and Stable Planar n-i-p Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Solar Cells Enabled by Oriented 1D Trigonal Selenium Structures. Advanced Science, 2020, 7: 2001013.
4. Zhiqiang Li, Xu Chen, Hongbing Zhua, Jingwei Chen, Yuting Guo, Chong Zhang, Wen Zhang, Xiaona Niu, Yaohua Mai; Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin film solar cells in substrate configuration and the back contact selenization; Solar Energy Materials & Solar Cells, 2017, 161: 190–196.
5. Zhiqiang Li<sup>\*</sup>, Hongbing Zhu, Yuting Guo, Xiaona Niu, Xu Chen, Chong Zhang, Wen Zhang, Xiaoyang Liang, Dong Zhou, Jingwei Chen, and Yaohua Mai<sup>\*</sup>. Efficiency enhancement of Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin-film solar cells by the co-evaporation of Se and Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>. Applied Physics Express, 2016, 9: 052302.

### 主要完成人情况表（排名、姓名、技术职称、工作单位、对本项目技术创造性贡献、曾获奖励情况）

排名	姓名	技术职称	工作单位	完成单位	贡献	曾获奖励情况
1	李志强	副教授	河北大学	河北大学	作为项目负责人，提出项目的总体研究思路及主要学术思想。全面负责该项目的组织和实施，对三个重要科学发现均做出了创造性的贡献。是代表性论文 1,4,5 的第一作者和通讯作者，代表性论文 2,3 的共同作者	
2	麦耀华	教授	暨南大学	河北大学/ 暨南大学	参与项目总体思想设计及主要学术思想验证；对主要科学发现点 1, 2 做出了创造性的贡献。代表性论文 1, 3, 4, 5 的通讯作者	2021 年河北省科技进步二等奖（排名第四）
3	梁晓杨	讲师	河北大学	河北大学	构建了基于一维链状硒化锑纳米阵列光吸收层的径向异质结太阳能电池结构，对主要科学发现点 3 做出了创造性的贡献。是代表性论文 1, 5 的共同作者。	

4	陈涛	教授	中国科学技术大学	中国科学技术大学	提出了硫硒化锑沉积过程中生长动力学调控理论，对主要科学发现点 2 和 3 做出了创造性的贡献。是代表性论文 2 的通讯作者
5	沈凯	副教授	暨南大学	暨南大学	构建了硫化镉/硒化锑/硒背部增强型器件结构，解决了背接触界面反向能带弯曲问题，有效降低了界面复合速率，对主要科学发现点 3 做出了创造性的贡献。是代表性论文 3 的第一作者和通讯作者

### 完成人合作关系说明

本项目完成人在“一维链状半导体材料生长机理和光伏器件研究”方面具有多年的合作基础。

一. 第二完成人麦耀华和第一完成人李志强从 2015 年开始合作研究，合作项目及文章列表如下：

1. **Zhiqiang Li\***, Xiaoyang Liang, Gang Li, Haixu Liu, Huiyu Zhang, Jianxin Guo, Jingwei Chen, Kai Shen, Xingyuan San, Wei Yu, Ruud E.I. Schropp, **Yaohua Mai\***; 9.2%-efficient core-shell structured antimony selenide nanorod array solar cells; Nature Communications; 2019, 10:125.
2. **Zhiqiang Li**, Xu Chen, Hongbing Zhua, Jingwei Chen, Yuting Guo, Chong Zhang, Wen Zhang, Xiaona Niu, **Yaohua Mai**; Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin film solar cells in substrate configuration and the back contact selenization; Solar Energy Materials & Solar Cells, 2017, 161: 190–196.
3. **Zhiqiang Li\***, Hongbing Zhu, Yuting Guo, Xiaona Niu, Xu Chen, Chong Zhang, Wen Zhang, Xiaoyang Liang, Dong Zhou, Jingwei Chen, and **Yaohua Mai\***. Efficiency enhancement of Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin-film solar cells by the co-evaporation of Se and Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>. Applied Physics Express, 2016, 9: 052302.
4. Chunsheng Guo, Xiaoyang Liang, Tao Liu, Yufan Liu, Lin Yang, Weidong Lai, Ruud E. I. Schropp, Dengyuan Song, **Yaohua Mai\*** and **Zhiqiang Li\***; 1D/3D Alloying Induced Phase Transition in Light Absorbers for Highly Efficient Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Solar Cells; Solar RRL; 2020, 4(4):2000054.
5. Xiaoyang Liang, Chunsheng Guo, Tao Liu, Yufan Liu, Lin Yang, Dengyuan Song, Kai Shen, Ruud. E. I. Schropp, **Zhiqiang Li\***, **Yaohua Mai\***; Crystallographic Orientation Control of 1D Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Nanorod Arrays for Photovoltaic Application by In Situ Back - Contact Engineering; Solar RRL; 2020, 4(10):2000294.
6. Xiaoyang Liang, Xu Chen, **Zhiqiang Li\***, Gang Li, Jingwei Chen\*, Lin Yang, Kai Shen, Ying Xu, **Yaohua Mai**; Effect of deposition pressure on the properties of magnetron sputtering deposited Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin film solar cells; Applied Physics A; 2019, 125(6): 381.
7. Kai Shen\*, Chizhu Ou, Tailang Huang, Hongbing Zhu, Jianjun Li, **Zhiqiang Li**, **Yaohua Mai\***, Mechanisms and modification of nonlinear shunt leakage in Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin film solar cell. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2018, 186: 58–65.
8. Chizhu Ou, Kai Shen\*, **Zhiqiang Li**, Hongbing Zhu, Tailang Huang, **Yaohua Mai\***. Bandgap tunable CdS:O as efficient electron buffer layer for highperformance Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin film solar cells. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2019, 194: 47–53.
9. Cong Liu, Kai Shen, Dongxu Lin, Ye Cao, Shudi Qiu, Jianzha Zheng, Feixiong Bao, Yanyan Gao, Hongbing Zhu, **Zhiqiang Li**, and **Yaohua Mai\***. Back Contact Interfacial Modification in Highly-Efficient All Inorganic Planar n-i-p Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Solar Cells. ACS Applied Materials and Interfaces. 2020, 12, 38397–38405.

二. 第三完成人梁晓杨和第一完成人李志强从 2017 年开始合作研究, 合作项目及文章列表如下:

1. 2019.01.01-2021.12.31, 国家自然科学基金青年科学基金项目 (No.61804040): 有序结构硒化锑太阳能电池异质结界面问题研究 (28 万) (李志强, 陈静伟, 梁晓杨, 李刚, 郭春升)。

2. **Xiaoyang Liang**, Hongbing Zhu, Jingwei Chen\*, Dong Zhou, Chong Zhang, Yuting Guo, Xiaona Niu, **Zhiqiang Li**, Yaohua Mai\*; Substrate temperature optimization for Cu(In, Ga)Se<sub>2</sub> solar cells on flexible stainless steels; Applied Surface Science; 2016, 368: 464–469.

3. **Zhiqiang Li\***, Hongbing Zhu, Yuting Guo, Xiaona Niu, Xu Chen, Chong Zhang, Wen Zhang, **Xiaoyang Liang**, Dong Zhou, Jingwei Chen, and Yaohua Mai\*. Efficiency enhancement of Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin-film solar cells by the co-evaporation of Se and Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>. Applied Physics Express, 2016, 9: 052302.

4. **Zhiqiang Li\***, **Xiaoyang Liang**, Gang Li, Haixu Liu, Huiyu Zhang, Jianxin Guo, Jingwei Chen, Kai Shen, Xingyuan San, Wei Yu, Ruud E.I. Schropp, Yaohua Mai\*; 9.2%-efficient core-shell structured antimony selenide nanorod array solar cells; Nature Communications; 2019, 10:125.)

5. **Xiaoyang Liang**, Xu Chen, **Zhiqiang Li\***, Gang Li, Jingwei Chen\*, Lin Yang, Kai Shen, Ying Xu, Yaohua Mai; Effect of deposition pressure on the properties of magnetron sputtering deposited Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin film solar cells; Applied Physics A; 2019, 125(6): 381.

6. Chunsheng Guo, **Xiaoyang Liang**, Tao Liu, Yufan Liu, Lin Yang, Weidong Lai, Ruud E. I. Schropp, Dengyuan Song, Yaohua Mai\* and **Zhiqiang Li\***; 1D/3D Alloying Induced Phase Transition in Light Absorbers for Highly Efficient Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Solar Cells; Solar RRL; 2020, 4(4):2000054.

7. **Xiaoyang Liang**, Chunsheng Guo, Tao Liu, Yufan Liu, Lin Yang, Dengyuan Song, Kai Shen, Ruud. E. I. Schropp, **Zhiqiang Li\***, Yaohua Mai\*; Crystallographic Orientation Control of 1D Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Nanorod Arrays for Photovoltaic Application by In Situ Back - Contact Engineering; Solar RRL; 2020, 4(10):2000294.

三. 第四完成人陈涛和第一完成人李志强从 2017 年开始合作研究, 合作项目及文章列表如下:

1. Xiaomin Wang, Rongfeng Tang, Chenhui Jiang, Weitao Lian, Huanxin Ju, Guoshun Jiang, **Zhiqiang Li**, Changfei Zhu, and **Tao Chen\***. Manipulating the Electrical Properties of Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> Film for High-Efficiency Solar Cell. Advanced Energy Materials 2020, 10: 2002341.

四. 第五完成人沈凯和第一完成人李志强从 2017 年开始合作研究, 合作项目及文章列表如下:

1. **Kai Shen\***, Yu Zhang, Xiaoqing Wang, Chizhu Ou, Fei Guo, Hongbing Zhu, Cong Liu, Yanyan Gao, Ruud E. I. Schropp, **Zhiqiang Li**, Xianhu Liu, and Yaohua Mai\*. Efficient and Stable Planar n-i-p Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Solar Cells Enabled by Oriented 1D Trigonal Selenium Structures. Advanced Science, 2020, 7: 2001013.

2. **Zhiqiang Li\***, Xiaoyang Liang, Gang Li, Haixu Liu, Huiyu Zhang, Jianxin Guo, Jingwei Chen, **Kai Shen**, Xingyuan San, Wei Yu, Ruud E.I. Schropp, Yaohua Mai\*; 9.2%-efficient core-shell structured antimony selenide nanorod array solar cells; Nature Communications; 2019, 10:125.)

3. Xiaoyang Liang, Chunsheng Guo, Tao Liu, Yufan Liu, Lin Yang, Dengyuan Song, **Kai Shen**, Ruud. E. I. Schropp, **Zhiqiang Li\***, Yaohua Mai\*; Crystallographic Orientation Control of 1D Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Nanorod Arrays for Photovoltaic Application by In Situ Back - Contact Engineering; Solar RRL; 2020, 4(10):2000294.

4. Xiaoyang Liang, Xu Chen, **Zhiqiang Li\***, Gang Li, Jingwei Chen\*, Lin Yang, **Kai Shen**, Ying Xu, Yaohua Mai; Effect of deposition pressure on the properties of magnetron sputtering deposited Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin film solar cells; Applied Physics A; 2019, 125(6): 381.
5. **Kai Shen\***, Chizhu Ou, Tailang Huang, Hongbing Zhu, Jianjun Li, **Zhiqiang Li**, Yaohua Mai\*, Mechanisms and modification of nonlinear shunt leakage in Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin film solar cell. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2018, 186: 58–65.
6. Chizhu Ou, **Kai Shen\***, **Zhiqiang Li**, Hongbing Zhu, Tailang Huang, **Yaohua Mai\***. Bandgap tunable CdS:O as efficient electron buffer layer for highperformance Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin film solar cells. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2019, 194: 47–53.
7. Cong Liu, **Kai Shen**, Dongxu Lin, Ye Cao, Shudi Qiu, Jianzha Zheng, Feixiong Bao, Yanyan Gao, Hongbing Zhu, **Zhiqiang Li**, and Yaohua Mai\*. Back Contact Interfacial Modification in Highly-Efficient All Inorganic Planar n-i-p Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Solar Cells. ACS Applied Materials and Interfaces. 2020, 12, 38397–38405.

**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	备注
1	共同立项	第一完成人李志强 第三完成人梁晓杨	2019.01.01-2021. 12.31	国家自然科学基金青年科学基金项目 (No.61804040)：有序结构硒化锑太阳电池异质 结界面问题研究	
2	论文合著	第一完成人李志强 第二完成人麦耀华 第三完成人梁晓杨 第五完成人沈凯	2017-2019	<b>Zhiqiang Li*</b> , <b>Xiaoyang Liang</b> , Gang Li, Haixu Liu, Huiyu Zhang, Jianxin Guo, Jingwei Chen, <b>Kai Shen</b> , Xingyuan San, Wei Yu, Ruud E.I. Schropp, <b>Yaohua Mai*</b> ; 9.2%-efficient core-shell structured antimony selenide nanorod array solar cells; Nature Communications; 2019, 10:125.	
3	论文合著	第一完成人李志强 第二完成人麦耀华	2015-2017	<b>Zhiqiang Li</b> , Xu Chen, Hongbing Zhu, Jingwei Chen, Yuting Guo, Chong Zhang, Wen Zhang, Xiaona Niu, <b>Yaohua Mai</b> ; Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> thin film solar cells in substrate configuration and the back contact selenization; Solar Energy Materials & Solar Cells, 2017, 161: 190–196.	
4	论文合著	第一完成人李志强 第二完成人麦耀华 第三完成人梁晓杨	2014-2016	<b>Zhiqiang Li*</b> , Hongbing Zhu, Yuting Guo, Xiaona Niu, Xu Chen, Chong Zhang, Wen Zhang, <b>Xiaoyang Liang</b> , Dong Zhou, Jingwei Chen, and <b>Yaohua Mai*</b> . Efficiency enhancement of Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> thin-film solar cells by the co-evaporation of Se and Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> . Applied Physics Express, 2016, 9: 052302.	

5	论文合著	第一完成人李志强 第二完成人麦耀华 第三完成人梁晓杨	2018-2020	Chunsheng Guo, <b>Xiaoyang Liang</b> , Tao Liu, Yufan Liu, Lin Yang, Weidong Lai, Ruud E. I. Schropp, Dengyuan Song, <b>Yaohua Mai*</b> and <b>Zhiqiang Li*</b> ; 1D/3D Alloying Induced Phase Transition in Light Absorbers for Highly Efficient Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> Solar Cells; Solar RRL; 2020, 4(4):2000054.
6	论文合著	第一完成人李志强 第二完成人麦耀华 第三完成人梁晓杨 第五完成人沈凯	2018-2020	<b>Xiaoyang Liang</b> , Chunsheng Guo, Tao Liu, Yufan Liu, Lin Yang, Dengyuan Song, <b>Kai Shen</b> , Ruud. E. I. Schropp, <b>Zhiqiang Li*</b> , <b>Yaohua Mai*</b> ; Crystallographic Orientation Control of 1D Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> Nanorod Arrays for Photovoltaic Application by In Situ Back - Contact Engineering; Solar RRL; 2020, 4(10):2000294.
7	论文合著	第一完成人李志强 第二完成人麦耀华 第三完成人梁晓杨 第五完成人沈凯	2017-2019	<b>Xiaoyang Liang</b> , Xu Chen, <b>Zhiqiang Li*</b> , Gang Li, Jingwei Chen*, Lin Yang, <b>Kai Shen</b> , Ying Xu, <b>Yaohua Mai</b> ; Effect of deposition pressure on the properties of magnetron sputtering deposited Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> thin film solar cells; Applied Physics A; 2019, 125(6): 381.
9	论文合著	第一完成人李志强 第二完成人麦耀华 第五完成人沈凯	2016-2018	<b>Kai Shen*</b> , Chizhu Ou, Tailang Huang, Hongbing Zhu, Jianjun Li, <b>Zhiqiang Li</b> , <b>Yaohua Mai*</b> , Mechanisms and modification of nonlinear shunt leakage in Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> thin film solar cell. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2018, 186: 58–65.
10	论文合著	第一完成人李志强 第二完成人麦耀华 第五完成人沈凯	2017-2019	Chizhu Ou, <b>Kai Shen*</b> , <b>Zhiqiang Li</b> , Hongbing Zhu, Tailang Huang, <b>Yaohua Mai*</b> . Bandgap tunable CdS:O as efficient electron buffer layer for highperformance Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> thin film solar cells. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2019, 194: 47–53.
11	论文合著	第一完成人李志强 第二完成人麦耀华 第五完成人沈凯	2018-2020	Cong Liu, <b>Kai Shen</b> , Dongxu Lin, Ye Cao, Shudi Qiu, Jianzha Zheng, Feixiong Bao, Yanyan Gao, Hongbing Zhu, <b>Zhiqiang Li</b> , and <b>Yaohua Mai*</b> .

				Back Contact Interfacial Modification in Highly-Efficient All Inorganic Planar n-i-p Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> Solar Cells. ACS Applied Materials and Interfaces. 2020, 12, 38397–38405.	
12	论文合著	第一完成人李志强 第四完成人陈涛	2018-2020	Xiaomin Wang, Rongfeng Tang, Chenhui Jiang, Weitao Lian, Huanxin Ju, Guoshun Jiang, <b>Zhiqiang Li</b> , Changfei Zhu, and <b>Tao Chen</b> *. Manipulating the Electrical Properties of Sb <sub>2</sub> (S,Se) <sub>3</sub> Film for High-Efficiency Solar Cell. Advanced Energy Materials 2020, 10: 2002341.	

注：所填报内容必须与推荐书中提交的完全一致，否则责任自负，可自行调整行间距。