

Research progress on power generation technology of solar photovoltaic materials Based on perovskite cells

Hanbing Liu¹ Rong Gu² Yixian mei¹ Junhao Huang² Zuhao Yan²

1. Chengxian College, Southeast University, Nanjing, Jiangsu, 210088, China

2. Xinjiang University of Finance and Economics, Urumqi, Xinjiang, 830012, China

Abstract

Perovskite cells, as efficient and low-cost solar photovoltaic materials, have attracted much attention due to their excellent photoelectric conversion efficiency (single-junction > 33%, tandem > 35%) and flexible characteristics. This paper reviews its core progress in power generation technology: Material component optimization improves stability and carrier mobility through the gradient design of mixed cations (FA+/MA+/Cs+) and halogens; Interface engineering utilizes functional layers such as SnO₂/Spiro-OMeTAD and two-dimensional perovskite passivation technology to suppress recombination loss and extend service life. The environmental protection direction focuses on lead-free tin/bismuth substrate materials and biodegradable packaging technologies to promote sustainable development. Meanwhile, the challenges of large-scale preparation and environmental stability were discussed, and the strategies of photovoltaic-thermoelectric collaborative optimization and AI design were proposed, providing a reference for the development of efficient and stable green photovoltaic technologies.

Keywords

Perovskite battery Solar photovoltaic materials Photoelectric conversion efficiency Power generation technology Interface engineering

基于钙钛矿电池剖析太阳能光伏材料发电技术的研究进展

刘寒冰¹ 谷蓉² 梅益仙¹ 黄俊豪² 闫祖豪²

1. 东南大学成贤学院, 中国·江苏·南京 210088

2. 新疆财经大学, 中国·新疆·乌鲁木齐 830012

摘要

钙钛矿电池作为高效低成本太阳能光伏材料, 因优异光电转换效率(单结>33%, 叠层>35%)及可柔性化特性备受关注。本文综述其在发电技术中的核心进展: 材料组分优化通过混合阳离子(FA+/MA+/Cs+)与卤素梯度设计, 提升稳定性与载流子迁移率; 界面工程利用SnO₂/Spiro-OMeTAD等功能层与二维钙钛矿钝化技术, 抑制复合损耗并延长寿命。环保方向聚焦无铅锡/铋基材料及生物降解封装技术, 推动可持续发展。同时, 探讨了规模化制备与环境稳定性挑战, 提出光-热电协同优化与AI设计策略, 为开发高效稳定绿色光伏技术提供参考。

关键词

钙钛矿电池; 太阳能光伏材料; 光电转换效率; 发电技术; 界面工程

1 引言

在全球能源结构绿色转型的背景下, 太阳能光伏材料作为发电技术的核心载体, 正推动可再生能源应用迈向新阶段。近年来, 钙钛矿太阳能电池的光电转换效率从3.8%跃升至26%, 展现出超越传统硅基器件的潜力, 同时, 界面工程通过有效抑制电荷复合与离子迁移, 成为提升器件性能的关键路径。本文系统梳理钙钛矿光伏材料在效率提升、稳定性强化及绿色化设计中的最新进展^[1], 揭示多尺度协同优化策略对推动光伏技术革新的重要意义, 为下一代高效、稳定、可持续的太阳能电池开发提供理论支撑。

【作者简介】刘寒冰(2005-), 女, 中国江苏盐城人, 本科, 从事功能材料(高分子方向)研究。

2 钙钛矿电池的来源与分类

2.1 钙钛矿电池的来源

钙钛矿电池的命名源自其核心材料——钙钛矿型晶体结构, 这种结构最早发现于1839年俄罗斯矿物学家古斯塔夫·罗斯(Gustav Rose)在乌拉尔山脉发现的天然矿物CaTiO₃(钛酸钙)。不过, 现代钙钛矿太阳能电池的材料并非直接使用天然矿物, 而是基于类似晶体结构(ABX₃型)的人工合成化合物。2009年, 日本科学家宫坂力(Tsutomu Miyasaka)团队首次将CH₃NH₃PbI₃(甲基铵铅碘)这类有机-无机杂化钙钛矿材料应用于染料敏化太阳能电池, 获得约3.8%的光电转换效率, 标志着钙钛矿光伏技术的开端。随后, 2012年牛津大学的Henry Snaith团队通过优化器件结构(如平面异质结), 将效率迅速提升至10%以上, 引

发全球研究热潮。钙钛矿电池的快速发展得益于其优异的光电特性（如高吸光系数、可调带隙）及低成本溶液制备工艺，现已成为第三代光伏技术的核心方向之一。

2.2 钙钛矿电池的分类

2.2.1 钙钛矿电池的发电机理与应用

钙钛矿电池的发电机理基于光生伏特效应：光照下，钙钛矿层（如 MAPbI_3 ）吸收光子产生电子-空穴对，激子在界面处快速分离，电子经传输层（如 TiO_2 ）流向阴极，空穴经传输层（如 Spiro-OMeTAD）流向阳极，形成电流。其高效性源于钙钛矿材料高光吸收系数、长载流子扩散长度及带隙可调性（1.2-2.3eV），可优化太阳光谱利用率。应用领域包括高效光伏电站：单结或叠层电池（如钙钛矿-晶硅串联）效率超 33%，适于大型发电；柔性可穿戴设备：轻质柔性基底（如 PET）支持曲面集成，用于移动电源、智能服饰光伏建筑一体化（BIPV）：半透明或彩色化设计替代玻璃幕墙，兼具发电与美观；低光照环境发电：高弱光响应特性适用于室内光能收集。

2.2.2 钙钛矿电池的特性与改性

钙钛矿电池特性：高效率、单结超 26%）、低成本溶液工艺、（旋涂/刮涂制备）、带隙可调、（1.2-2.3 eV 适配叠层设计）、弱光响应优（室内适用），但存在、稳定性差（湿热/光照衰减）和铅毒性问题。

改性方向：稳定性提升：界面钝化（如 PEAI）、二维/三维异质结设计、抗氧化传输层（如 NiO_x ）、原子层沉积封装；无铅化：锡基（ CsSnI_3 ）或双钙钛矿（ $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ ），降低环境风险；工艺优化：刮涂/喷墨打印提升均匀性，真空沉积减少缺陷；叠层集成：与晶硅（效率 > 33%）或 CIGS 串联，突破效率极限；柔性扩展：采用聚合物基底（PET）或超薄封装，适配可穿戴设备。

2.2.3 钙钛矿电池的作用机制

钙钛矿电池发电机制基于光生伏特效应光吸收与激子生成：钙钛矿层（如 MAPbI_3 ）吸收光子后产生电子-空穴对，其高吸光系数（ $> 10^4 \text{cm}^{-1}$ ）使薄膜厚度仅需 300-500nm 即可高效捕光；电荷分离与传输：激子在钙钛矿/传输层界面快速分离（载流子扩散长度 $> 1\mu\text{m}$ ），电子经电子传输层（如 TiO_2 ）流向阴极，空穴经空穴传输层（如 Spiro-OMeTAD）流向阳极；能带匹配：通过调节钙钛矿组分（如 A/B/X 位离子替换），优化带隙（1.2-2.3eV）与传输层能级对齐，减少复合损失；^[2] 界面工程：钝化晶界缺陷（如引入 PEAI）提升载流子寿命。其高效性源于材料特性（载流子迁移率高、缺陷容忍度强）与结构设计（平面/介孔异质结），但需克服离子迁移、相分解等稳定性瓶颈。

3 钙钛矿电池在太阳能光伏材料中的应用研究进展

3.1 高效单结及柔性光伏组件创新

钙钛矿单结电池通过组分优化（如 FAPbI_3 铯掺杂）和界面钝化技术（PEAI、PMMA），实验室效率突破 26%，

成本仅为传统光伏的 1/3。其超薄特性推动柔性组件发展，韩国成均馆大学研发的 PET 基柔性电池效率达 23.5%，适配无人机、可穿戴设备等轻量化场景。

3.2 多功能场景拓展与产业化进程

面向 BIPV，半透明电池（ITO/Ag 纳米线电极）实现 $> 30\%$ 透光率与 $> 15\%$ 效率，应用于智能玻璃幕墙^[3]；无铅钙钛矿（锡基 CsSnI_3 、双钙钛矿 $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ ）效率超 12%，兼顾环保需求。稳定性改良（二维/三维异质结、原子层沉积封装）使组件通过 IEC61215 测试，寿命预估超 20 年。协鑫光电、牛津光伏等企业已建成百兆瓦级产线，推动钙钛矿与硅基、薄膜技术融合，加速下一代光伏体系落地。

4 钙钛矿电池与传统发电材料的性能对比

4.1 发电效率对比

4.1.1 传统发电材料

晶硅电池：单晶硅：实验室最高效率 6.7%（PERC 结构），商业化组件效率 20%-22%；

多晶硅：实验室效率约 3.3%，组件效率 17%-19%；^[4] 异质结（HJT）/TOPCon：实验室效率超 26%，组件效率 24%-25%。薄膜电池：CIGS（铜铟镓硒）：实验室效率 23.4%，组件效率 15%-19%；CdTe（碲化镉）：实验室效率 22.1%，组件效率 18%-20%；有机光伏（OPV）：实验室效率约 18%，组件效率低于 10%。

4.1.2 钙钛矿电池

单结钙钛矿电池：实验室效率突破 6%（2023 年认证数据），接近晶硅电池极限，但制备成本仅为晶硅的 1/3~1/5；弱光响应强，室内光下效率可达 30%~35%（如 LED 光源）。叠层电池：钙钛矿-晶硅叠层：实验室效率达 33.9%（牛津光伏），远超单结晶硅的肖克利-奎伊瑟极限（29.4%）；全钙钛矿叠层：实验室效率超 28%，理论极限超 40%。柔性/半透明电池：柔性钙钛矿组件效率 23%~25%（PET 基底），远超柔性晶硅（约 18%）；半透明电池效率 15%~18%（透光率 $> 30\%$ ），显著高于半透明晶硅（8%-10%）。

4.2 环境与健康影响

4.2.1 碳排放与空气污染

燃煤发电是全球最大 CO_2 排放源（约 40% 的能源相关碳排放），同时释放 SO_2 、 NO_x 、PM2.5 等污染物，导致酸雨、雾霾及呼吸道疾病。据 WHO 统计，每年约 700 万人因空气污染过早死亡。石油和天然气开采泄漏（如甲烷逸散）加剧温室效应，甲烷的全球变暖潜能值（GWP）是 CO_2 的 28-36 倍。

4.2.2 降解性分析

晶硅电池耗制造高，多晶硅提纯（西门子法）耗电量达 80-100 kWh/kg，碳排放约 50 kg $\text{CO}_2\text{eq/kg}$ ；生产过程中产生四氯化硅（ SiCl_4 ），遇水生成盐酸，污染土壤及水体。CdTe 薄膜电池：镉（Cd）为 I 类致癌物，慢性暴露导致肾衰竭、骨软化（“痛痛病”）；回收困难，First Solar 公司

开发闭环回收系统（回收率超 90%），但发展中国家仍存在随意丢弃风险。CIGS 薄膜电池：铟资源稀缺，铟（In）储量有限（全球约 5 万吨），开采伴生铅、锌污染，威胁矿区生态。

4.3 经济性分析

钙钛矿电池因其低成本和高效率成为光伏领域的研究热点。其核心材料（如铅、卤素等）储量丰富且价格低廉，原料成本仅为硅基电池的 1/3-1/5。制造工艺采用溶液法或真空沉积技术，可在常温常压下完成，生产能耗较硅电池降低 70% 以上，单条产线投资额减少约 60%。近年来转换效率突破 26%（2023 年数据），理论极限达 33%，叠加硅基电池的叠层技术更可达 45%。若突破稳定性技术，其平准化度电成本（LCOE）有望降至 0.15 元/千瓦时，较当前主流光伏技术再降 30%，将成为最具经济性的可再生能源解决方案之一。

5 钙钛矿电池的性能优化策略

5.1 材料组分工程

阳离子/阴离子调控：通过混合 FA⁺、MA⁺、Cs⁺ 等有机-无机阳离子，并调节卤素（I/Br/Cl）比例，优化晶格稳定性与带隙（1.48-1.6eV），减少非辐射复合。例如，FA 基钙钛矿（FAPbI₃）可将效率提升至 25%。

低维钙钛矿结构：引入 2D/3D 异质结（如 PEA₂PbI₄），增强湿度稳定性，同时利用量子限域效应调控载流子传输。

5.2 界面工程

载流子传输层优化：采用 Spiro-OMeTAD（空穴层）与 TiO₂/ZnO/SnO₂（电子层）的梯度掺杂，降低界面电阻。[5] 新型材料（如 NiO_x、PCBM）可减少界面缺陷态密度。

钝化层设计：在钙钛矿表面沉积路易斯碱（如 KPF₆）或聚合物（如 PMMA），钝化未配位 Pb²⁺ 缺陷，抑制离子迁移，使器件 Voc 提升至 1.2V。

6 挑战与未来展望

6.1 当前问题

6.1.1 稳定性缺陷：环境耐受性不足

钙钛矿材料对湿度、光照、温度等环境因素极为敏感，导致器件性能快速衰减：

水氧侵蚀：钙钛矿晶格中的有机组分（如 MA⁺）易与水反应分解，产生 PbI₂ 等非活性相；离子迁移：光照或偏压下，卤素离子（I/Br）和金属离子（Pb²⁺）在晶界或界面处迁移，引发相分离或电极腐蚀；热不稳定性：高温（> 85°C）加速晶格畸变，尤其在钙钛矿/传输层界面形成缺陷态；光致退化：强光照射导致光生载流子积累，诱发不可逆的化学分解（如 CH₃NH₃PbI₃ → PbI₂+CH₃NH₃I）。

实验室标准测试（如 85°C/85% RH 老化）下，多数器件寿命仍不足 1000 小时，远低于商业化要求的 25 年（等效约 10⁴ 小时）。

6.1.2 铅毒性争议：环保与回收难题

尽管铅元素对高效率至关重要（带隙调控依赖 Pb²⁺ 的

电子结构），但其环境风险引发争议：铅泄漏风险：传统封装技术难以完全阻隔铅在器件破损时的释放，单块组件含铅量约 0.4g/m²；无铅替代困境：锡（Sn²⁺）基钙钛矿易氧化，铋（Bi³⁺）基材料效率不足 10%，锗（Ge²⁺）基带隙过宽，均无法兼顾效率与稳定性；回收技术空白：尚未建立高效、低成本的铅回收工艺，循环经济模式缺失。

6.2 未来重点研究方向

6.2.1 稳定性提升与长效机理研究

当前钙钛矿电池的商业化最大瓶颈是环境稳定性不足。未来研究需聚焦于：

材料本征稳定性优化，通过组分工程（如 A 位阳离子掺杂、X 位卤素调控）和缺陷钝化技术抑制离子迁移；界面工程开发新型空穴传输层（如无机 NiO_x）和电子传输层材料，减少界面电荷复合；封装技术创新，开发多层阻隔膜和自修复封装材料，抵御水氧侵蚀。

6.2.2 大面积制备与工艺革新

实验室级小尺寸器件（< 1 cm²）效率已突破 26%，但放大至组件级别时效率骤降。重点需突破：开发狭缝涂布、气相沉积等可扩展制备技术，实现均匀成膜；优化结晶动力学控制，解决大面积薄膜的针孔缺陷和晶界问题；开发低温制备工艺（< 150°C），适配柔性基底与叠层电池需求。

6.2.3 环境友好型材料体系开发

针对铅毒性和溶剂污染问题，研究方向包括：开发铋、锡基无铅钙钛矿（如 Cs₂AgBiBr₆、MASnI₃），目前需克服 Sn²⁺ 氧化和带隙过窄问题；构建铅固定化结构，如螯合聚合物封装层；发展绿色溶剂体系（如离子液体、水相合成），替代 DMF 等有毒溶剂。

7 结论与展望

钙钛矿电池凭借高吸光性、带隙可调及低温工艺，成为光伏领域颠覆性技术。当前效率与柔性应用已突破瓶颈，但稳定性与铅泄漏问题亟待解决。未来需聚焦：超薄封装抑制离子迁移；无铅材料开发（如双钙钛矿）；规模化工艺（卷对卷技术）降低成本；标准体系优化寿命评估。多学科融合将推动其与硅基技术协同，加速光伏建筑、可穿戴能源等场景落地，成为全球碳中和的核心助力。

参考文献

- [1] 陈艳丽,陈卫东,胡中爱. 太阳能光伏材料的研究进展[J]. 化工科技,2015,23(3):73-76. DOI:10.3969/j.issn.1008-0511.2015.03.019.
- [2] 罗龙.钙钛矿太阳能电池关键界面和器件性能研究[D].华中科技大学,2023.DOI:10.27157/d.cnki.ghzku.2023.001996.
- [3] 李曼亚,李禄东,刘洲,等.柔性钙钛矿光伏:研究进展、商业化进程和展望[J].发光学报,2023,44(03):466-485.
- [4] 袁赫泽,陈新亮,梁柄权,等.晶硅太阳能电池钝化层技术研究进展[J].物理学报,2025,74(04):239-261.
- [5] 王三龙,高京萍,祖阔,等.界面工程技术用于空气环境制备的高性能倒置无机钙钛矿太阳能电池[J].硅酸盐学报,2025,53(04):941-947.DOI:10.14062/j.issn.0454-5648.20240633.