



钙钛矿太阳能电池：进展、挑战与未来展望

赵石凯, 郭鹏鹏*

太原理工大学 新材料界面科学与工程教育部和山西省重点实验室, 太原 030024

摘要：太阳能作为一种可再生且环境友好的能源，正逐渐成为能源转型的核心方向。利用太阳能电池将光能转化为电能，是当前太阳能资源开发的主要方式。在各类太阳能电池中，晶硅太阳能电池凭借优异的能量转换效率和稳定性，始终占据市场主导地位。近年来，钙钛矿太阳能电池（perovskite solar cells, PSCs）因其快速提升的光电转换效率、简便的制造工艺以及较低的生产成本，成为光伏领域的研究热点。目前实验室条件下，PSCs的光电转换效率已突破26%。但PSCs的性能和稳定性受到钙钛矿材料结构、器件界面质量及封装技术等因素制约。本文综述了近年来钙钛矿太阳能电池的研究进展，重点探讨材料科学、效率与稳定性优化方面的成果，剖析制造工艺中的现存问题，并就大面积制备、长期稳定性以及环境毒性等应用挑战展开讨论，同时展望未来发展趋势。通过对该领域技术发展现状的系统梳理，阐述了钙钛矿太阳能电池所面临的挑战及其发展潜力。

关键词：太阳能电池；钙钛矿太阳能电池；钙钛矿材料；界面工程；空穴传输层

中图分类号：T-19；TM914.4；TB34

文献标识码：A

文章编号：1674-4969(2026)03-0292-20

引言

随着不可再生化石能源的日益枯竭和生态环境的持续恶化，可再生且可持续利用的绿色能源已成为能源领域研究的焦点。太阳能作为一种广泛存在的可再生清洁能源，其受地域和环境限制较小，能在多数地区被有效收集和利用，因此成为了当前研究的热点

点^[1]。当前，太阳能的利用方式涵盖光-电、光-热、光-化学及光-生物转换等。光热转换和光电转换是当前社会生产中的主要利用方式，光电转换是通过半导体材料受光激发产生电子-空穴对来实现光能向电能的转换。太阳能电池多是基于半导体材料自身特性或半导体器件结构，通过光生伏特效应实现光能向电能的转换，应用规模迅速扩大，技术不断进步，发展前

收稿日期：2025-02-20； **修回日期：**2025-04-25

基金项目：国家自然科学基金项目(22372114)；山西省自然科学基金(202203021211143)

作者简介：赵石凯（1998—），男，博士研究生，研究方向为钙钛矿太阳能电池。E-mail: shikaizhao@163.com

*郭鹏鹏（1983—），男，博士，教授，研究方向为有机半导体材料的设计、合成和在太阳能电池中的应用。E-mail: guokunpeng@tyut.edu.cn（通讯作者）

引用格式：赵石凯, 郭鹏鹏. 钙钛矿太阳能电池：进展、挑战与未来展望[J]. 工程研究——跨学科视野中的工程, 2026, 18(3): 292-311. DOI: 10.3724/j.issn.1674-4969.20250021. CSTR: 32282.14.JES.20250021

ZHAO S K, GUO K P. Perovskite Solar Cell: Progress, Challenges and Future Prospects[J]. Journal of Engineering Studies, 2026, 18(3): 292-311. DOI: 10.3724/j.issn.1674-4969.20250021. CSTR: 32282.14.JES.20250021

景广阔^[2]。现有太阳能电池主要经历三代, 晶硅太阳能电池(单晶、多晶)、薄膜太阳能电池(非晶硅、Ⅲ-V族化合物等)和新型太阳能电池(有机、染料敏化、量子点、钙钛矿等)^[3-4]。单晶硅太阳能电池以高稳定性、高转换效率、长寿命等优势占据太阳能电池的绝大部分商业市场。第一代和第二代太阳能电池的生产成本较高、制备工艺相对复杂, 随着市场提效降本的要求, 研究更高效、更低廉的电池成为光伏领域的进一步目标^[5]。钙钛矿太阳能电池属于第三代新型太阳能电池技术之一, 可通过溶液旋涂等工艺进行器件制备, 制备所需原料的价格也较为低廉, 有望成为可商业化的下一代高效太阳能电池。2009年Cao等^[6]尝试将有机-无机卤化铅钙钛矿作为敏化剂应用于染料敏化太阳能电池中, 并在2011年报道了钙钛矿材料在电池中的功率转换效率(power conversion efficiency, PCE)达到6.5%。目前, 钙钛矿太阳能电池(perovskite solar cell, PSC)已报道的认证转换效率已超过26%, 被认为是第一代晶硅太阳能电池的理想替代品^[7]。

从固态钙钛矿太阳能电池的初期报道开始, 在材料化学、结构设计、工艺流程以及器件制备与封装等方面的研究不断进步, 推动了固态钙钛矿太阳能电池的革命性发展。过往综述多关注于单一环节, 如钙钛矿材料^[1,6]、有机空穴传输材料、无机空穴传输材料等^[7], 但对材料、器件结构、器件优化的整合综述相对较少。本文将系统介绍近几年钙钛矿太阳能电池的发展, 重点关注钙钛矿材料的对比与优化(有机/无机、带隙调节), 结合太阳能电池器件结构、制备工艺、重点问题等因素详细讨论PSCs的发展和未来挑战。旨在提供较全面的视角, 分析钙钛矿材料应用于光伏技术的发展现状, 探讨这一领域面临的挑战和未来的发展潜力。

1 太阳能电池材料

1.1 传统太阳能电池材料

第一代太阳能电池是光伏技术中最为成熟且广泛应用类型, 占据了光伏市场的主导地位。依据所采

用硅材料的差异, 晶硅太阳能电池被划分为两大类: 单晶硅(monocrystalline silicon)与多晶硅(polycrystalline silicon)。图1展示了当前市场上主流的晶硅太阳能电池。单晶硅太阳能电池由高纯度单晶硅制成, 而多晶硅太阳能电池则由多个硅晶体取向各异的颗粒构成, 这些颗粒通常经由浇铸法或直接凝固法获得, 能够直接制得方形多晶硅材料^[8]。

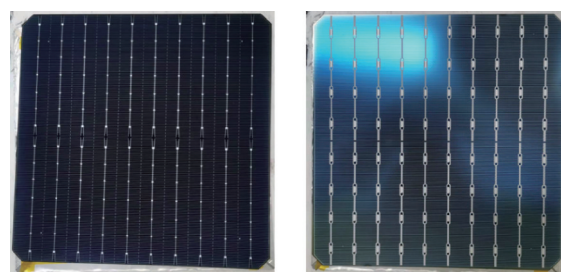


图1 晶硅太阳能电池
Figure 1 Crystalline silicon solar cells

当前市场上应用的太阳能发电系统, 平均使用寿命已达25 a, 是太阳能转化为电能的关键产品。图2展示了截至2024年11月已公开的晶硅太阳能电池认证效率的发展历程^[9]。

非晶硅薄膜太阳能电池是一种基于非晶态硅的薄膜光伏技术, 它采用的是无定形结构的硅材料, 而非

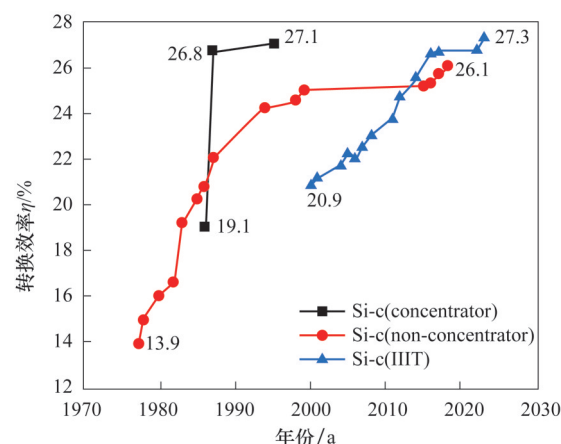


图2 晶硅太阳能电池认证效率发展图。黑色为单晶聚光型, 红色为单晶非聚光型, 蓝色为异质结型^[9]

Figure 2 Development chart of certification efficiency of crystalline silicon solar cells. The black line represents monocrystalline concentrator technology, the red line represents monocrystalline non-concentrator technology, and the blue line represents heterojunction technology^[9]

晶体硅, 其原子排列与晶体硅的规则晶格结构截然不同。多元化合物薄膜太阳能电池技术则源自 20 世纪 60 年代, 目前在太阳能领域所占份额正迅速增长, 主要包括砷化镓、铜铟镓硒、碲化镉等类型的太阳能电池^[10]。这类电池能显著降低原材料消耗, 成本较硅片技术更具优势, 同时具备柔韧性等新特性, 为特殊应用提供了更多可能。此外, 其较高的光电转换效率使之成为当前极具应用潜力的太阳能电池技术之一。

砷化镓(GaAs)薄膜太阳能电池的光电转换效率可高达 25%, 这得益于其理想的光学带隙、卓越的光吸收能力、出色的抗辐射性能以及对温度变化不敏感等特性, 使其成为制造高性能单结太阳能电池的理想之选^[11]。然而, 高昂的 GaAs 材料成本在很大程度上阻碍了其在太阳能电池领域的广泛应用。

铜铟镓硒(CIGS)薄膜太阳能电池通过涂覆于玻璃基板的多层薄膜, 实现了太阳光向电能的转化。在非硅基电池中, 它们拥有相对较高的光吸收系数, 从而展现出较高的转换效率和良好的稳定性。在所有类型中, CIGS 薄膜太阳能电池应用最为广泛, 在薄膜电池行业中占据着重要的市场份额^[12]。

碲化镉(CdTe)薄膜太阳能电池因其材料丰富, 生产成本低, 并具有较好的环境稳定性和耐久性, 适合大规模生产。使用单晶 CdTe 吸收层并选择性地用磷(P)掺杂, 使得 P 分布在碲(Te)位点, 而不是传统的铜(Cu)掺杂和 CdCl₂ 热处理, 成功创下 1.017 V 的新纪录^[13]。但是 CdTe 材料中的镉(Cd)具有一定的毒性, 需要妥善处理以避免环境污染。

1.2 钙钛矿太阳能电池材料

钙钛矿材料制备的太阳能电池, 凭借其低成本、低能耗、广泛的材料来源以及卓越的光电特性, 展现出巨大的发展潜力。目前, 制备太阳能电池所用的钙钛矿材料主要分为金属卤化物和有机化合物两大类。起初, 钙钛矿是指名为钛酸钙(CaTiO₃)的矿物, 之后该术语被扩展用于描述与 CaTiO₃ 相同晶体结构的一类材料。钙钛矿材料的通用化学式为 ABX₃, 其中 A 通常代表有机阳离子(例如 CH₃NH₃⁺), 与 12 个 X 阴离子配位, 形成一个立方八面体框架; B 代表金属阳离

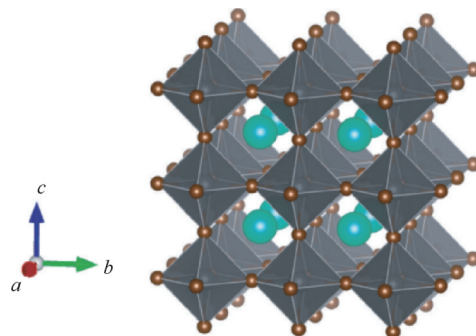


图3 3D 钙钛矿晶体结构图^[15]

Figure 3 The 3D perovskite crystal structure diagram^[15]

子(例如 Pb²⁺), 呈六配位并形成位于立方八面体中心的八面体; X 则代表卤素阴离子(例如 I⁻)^[14]。图 3 展示了其晶体基础结构, 这种结构稳定的八面体通过紧密堆积, 赋予了材料高光吸收系数、低载流子复合概率以及高载流子迁移率等特性, 促进了材料内部电子和空穴的有效分离与传输。

通过调节“A”“B”和“X”离子的组成比例, 可显著改变钙钛矿材料的光电性能, 从而为优化钙钛矿太阳能电池(PSCs)效率提供多种途径。钙钛矿材料凭借其高吸收系数, 仅需一层薄膜即可充分捕获太阳光。此外, 其低载流子复合概率、高载流子迁移率, 以及较长的载流子寿命和迁移距离, 确保了内部生成的载流子能够更有效地传输与收集, 进而实现器件效率的提升^[16]。深入探究有机-无机卤化铅钙钛矿材料的光学特性至关重要, 因为这些特性与材料的能带结构、分子构成、激子效应、局部缺陷以及晶格振动等因素紧密相连。图 4 展示了截至 2024 年 11 月已报道的钙钛矿太阳能电池认证效率的发展历程^[9]。

在 PSCs 中, 常见的 3D 钙钛矿多以多晶薄膜形态存在, 其中多晶界的引入会导致显著的非辐射复合现象, 进而引起电池器件性能的衰退。界面缺陷作为钙钛矿领域的另一大挑战, 对钙钛矿的光电特性和使用稳定性有着明显的影响。制备 PSCs 时, 钙钛矿材料通常采用溶液法合成, 薄膜的制备方法丰富多样, 包括旋涂法、真空辅助沉积、叶片涂布以及狭缝模涂布等^[17]。钙钛矿薄膜的本体、晶界及表面不可避免地存在多种缺陷, 这会引发非辐射复合损失等问题, 从而降低器件的光电转换效率和长期稳定性, 通过钝化

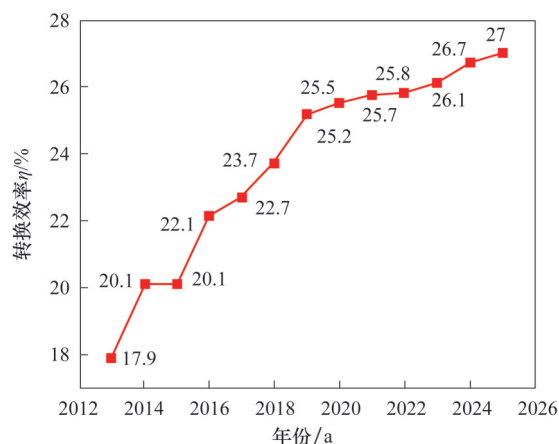


图4 钙钛矿太阳能电池认证效率发展图^[9]

Figure 4 Certified efficiency development chart for perovskite solar cells^[9]

处理减少此类缺陷是优化性能的关键策略^[18]。然而,即使在缺陷钝化后,PSCs在温度、湿度、光照等环境因素下的长期稳定性仍是商业化面临的主要挑战。

2 钙钛矿太阳能电池工作原理和器件

2.1 工作原理

钙钛矿太阳能电池的工作原理与晶硅太阳能电池相仿,均基于光电效应实现光能向电能的转换。当阳光照射至钙钛矿层,光子激发产生电子-空穴对。这些载流子随后被电子传输层(electron transport layer, ETL)和空穴传输层(hole transport layer, HTL)捕获并传输到两端电极,再通过外接闭合回路收集所产生的电能。

作为太阳能电池的一种,钙钛矿太阳能电池的性能表征参数与晶硅太阳能电池相似,涵盖:短路电流密度(J_{sc})、短路电流(I_{sc})、开路电压(V_{oc})、填充因子(FF)、外量子效率(EQE)以及光电转换效率(PCE)等^[19]。当前测试方法结合了太阳光模拟器和数据采集系统,主要对电池的电流密度-电压(J - V)特性和PCE进行表征。测试时,使用氙灯模拟太阳光,其照射强度被设定为AM 1.5 G光谱,于标准测试条件(光强 100 mW/cm²、环境温度 25°C、AM 1.5 G 阳光)下测定 J - V 曲线,所得结果中的 P_{max} 即代表电池的 PCE。在电流为零时,对应的电压值为 V_{oc} ; 电压为

零时,电流密度则为 J_{sc} 。填充因子通过 V_{max} 和 J_{max} 计算得出,具体如式(1)所示:

$$FF = (V_{max} \times J_{max}) / (V_{oc} \times J_{sc}) \quad (1)$$

式中, J_{max} 为 J - V 曲线上的最大输出电流; V_{max} 为 J - V 曲线上的最大输出电压。钙钛矿太阳能电池的 PCE 通常根据光伏性能指标进行评估,如式(2)所示:

$$PCE = P_{out} / P_{in} = (V_{oc} \times J_{sc} \times FF) / P_{in} \quad (2)$$

式中, P_{out} 是最大输出功率; P_{in} 是输入功率。 P_{out} 值是从标准条件下(AM 1.5 G 阳光,强度为 100 mW/cm², 25°C)测试的电流密度-电压(J - V)特性中提取的,它可以用短路电流密度(J_{sc})、开路电压(V_{oc})和填充因子(FF)的乘积来表示。

此外,针对各功能层还需测试光吸收系数、载流子寿命和扩散长度(时间分辨光致发光(time-resolution photoluminescence, TRPL)和空间分辨光致发光(spatially resolved photoluminescence, SRPL)、带隙宽度、稳定性(湿度、温度、使用寿命等 ISOS 测试标准)等其他重要参数。

2.2 器件制备

器件制备流程中,薄膜的质量对电池效率具有直接影响。研究人员已开发出诸如旋涂、真空辅助沉积以及丝网印刷等多种制备技术,这些技术使得大面积且均匀的钙钛矿薄膜制备成为可能,从而推动了钙钛矿太阳能电池商业化的进程^[20]。在采用一步法旋涂制备钙钛矿薄膜时,钙钛矿前体混合溶液中需要添加适量有机铅盐以配制钙钛矿混合溶液,随后通过旋涂等方式均匀涂覆于导电玻璃基底之上。然而,该法制备的薄膜往往表面形貌欠佳,晶粒呈现不连续性。在一步法旋涂镀膜过程中,对晶体生长动力学的精准控制至关重要,这可通过反溶剂滴加或利用 Lewis 酸碱加合物形成的中间产物来优化^[21]。

界面工程的研究也促进了 V_{oc} 和 FF 的提升。PSCs 在溶液结晶过程中,晶粒生长并相互接触,产生原子间力和双向拉伸应变(BTS),导致离子从晶粒中心向侧面流动,形成晶粒表面凹陷(GSCs),GSCs 的存在导致晶粒中心与电荷传输层之间形成纳米级间隙,这些间隙会增加非辐射复合,从而降低 V_{oc} 和 FF。Xiao 等^[22]引入三氟代辛烷-1-磺酸钾(TFSAP)作为添加剂调

节晶粒生长动力学, 减少GSCs的形成。通过TFSAP分子极性磺酸基团与钙钛矿表面的碘空位相互作用, 并利用氟碳链防止自聚集, 使得电荷传输路径更加直接和高效, 从而提高了 V_{oc} 和FF。Zhang等^[23]在PTAA/钙钛矿界面引入功能化的 Al_2O_3 纳米粒子层, 利用2-thenoylacetonitrile(2-T-OACN)分子的 $C=O-Pb^{2+}$ 和 $C\equiv N-Pb^{2+}$ 配位相互作用钝化钙钛矿底部表面的缺陷, 促进界面电荷载流子传输, 降低界面复合。Li等^[24]使用4-羟基吡啶酸(4HPA)定制 $FAPbI_3$ 薄膜与空穴传输层之间的界面, 控制钙钛矿薄膜的表面结构和能级对齐。4HPA处理后, 钙钛矿的价带和导带边缘发生移动, 优化了能级对齐, 有利于光生载流子的提取, 提高了 V_{oc} 。

在一步法的基础上, 两步法制备钙钛矿薄膜获得了更高效稳定的PSCs。2013年, 通过两步涂层方法已实现了14.1%的PCE^[25]。Zhao等^[26]报道了采用两步涂覆法制备出稳定且高质量的大尺寸钙钛矿薄膜, 其PCE高达26.1%(经认证为25.6%)。尽管两步法在控制钙钛矿晶粒尺寸与形貌方面具有显著优势, 但一步法在成本效益上更为突出。真空辅助沉积技术涵盖真空闪蒸溶剂与真空蒸发钙钛矿源两种制备方法。真空闪蒸法的机理与溶剂工程相似, 能有效控制溶剂残留。其本质在于通过形成Lewis酸碱型加合物, 加速钙钛矿薄膜的结晶过程, 从而获得高质量的钙钛矿吸光层^[27]。利用真空辅助沉积技术可在大面积基底上制备出高质量且分布均匀的钙钛矿薄膜, 但与溶液法制备技术相比, 其成本依然高出许多。对于最终的商业化应用而言, 成本问题仍是亟待解决的难题。最近, 连续真空蒸发法制备的器件PCE已达24.42%^[28], 为大规模产业化提供了一条颇具前景的路径。在现有工艺中得到的钙钛矿薄膜需经历后退火步骤以促进钙钛矿晶体的形成, 即由黄相加热转变为黑相(结晶), 如图5所示。加热温度与加热时长是后退火工艺的关键参数, 同时外界环境(如湿度、气氛等)对薄膜质量亦有显著影响。通常, 水分的侵入对钙钛矿太阳能电池是不利的, 会破坏其内部结晶结构。研究发现, 在潮湿大气中对钙钛矿层进行退火会导致载流子迁移率和晶粒尺寸显著增加。You等^[29]研究了钙钛矿前体薄膜在潮湿环境中进行通孔热退火的生长模式, 这一方

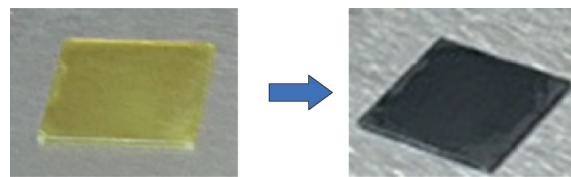


图5 钙钛矿太阳能电池后退火相变图

Figure 5 Post annealing phase transition of perovskite solar cell

法显著提升了薄膜质量、晶粒尺寸、载流子迁移率及寿命。Xie等^[30]则证实, 真空辅助热退火是调控 $CH_3NH_3PbI_3$ 薄膜成分与形态的有效手段, 真空条件可通过快速消除副产物甲基氯化胺(MACI)来辅助热退火过程。

制备工艺的选择需综合考虑成膜质量、加工要求及成本等因素。当前, 结合真空沉积与溶液处理的混合工艺正逐渐成为制备高性能薄膜的首选方法, 同时, 也有越来越多的制备工艺在不断被探索和应用。

2.3 器件结构及优化

钙钛矿太阳能电池通常由多个功能层叠加构建, 其核心结构涵盖透明导电电极、电子传输层、钙钛矿吸光层(PVK)、空穴传输层以及金属导电电极。为提升电池的整体效能, 研究人员持续探索新颖的结构设计方案, 诸如平面正式结构、平面异质结构以及无HTL层结构等。

钙钛矿太阳能电池结构的发展历程中, 几个关键阶段尤为显著。其中, 正式钙钛矿太阳能电池采用n-i-p结构, 其基本构成自上而下依次为金属电极、HTL、PVK、ETL及透明电极。当前, 研究者们还在平面正式结构中引入介孔层, 形成介孔结构; 或者将HTL与ETL的位置互换, 得到反式结构; 同时, 钝化层的加入也进一步增强了钙钛矿太阳能电池的各项性能^[31]。主流钙钛矿太阳能电池的结构示意图如图6所示。

钙钛矿层作为钙钛矿太阳能电池的核心功能层, 决定了光的吸收效率, 并直接关乎载流子(电子-空穴对)的生成、分离及传输等能力。该层通常由无机铅卤化物(例如 $CH_3NH_3PbX_3$)构成, 置于电子传输层(ETL)与空穴传输层(HTL)之间, 负责产生可自由移

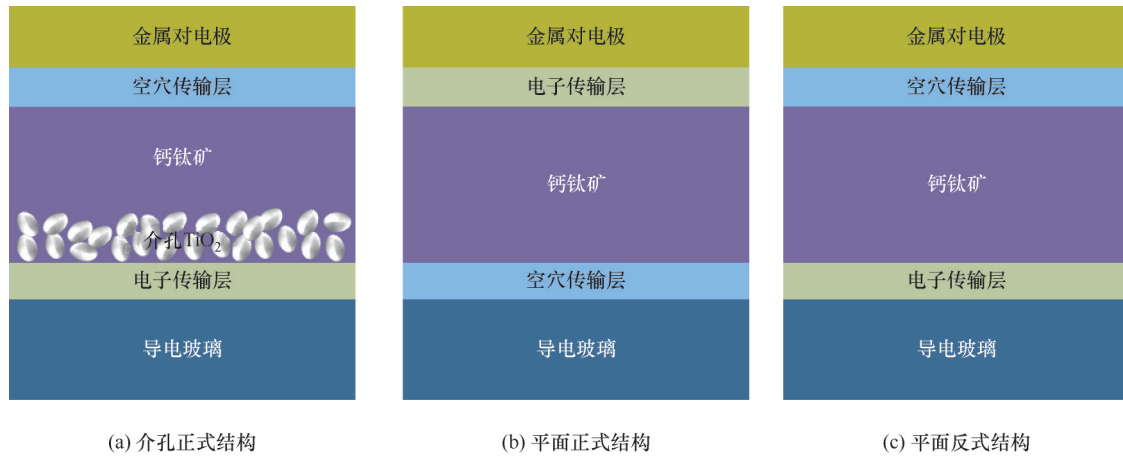


图6 钙钛矿太阳能电池器件结构。介孔正式结构(a); 平面正式结构(b); 平面反式结构(c)^[31]

Figure 6 Perovskite solar cell device structure. Mesoporous formal structure (a); Plane formal structure (b); Planar trans structure (c)^[31]

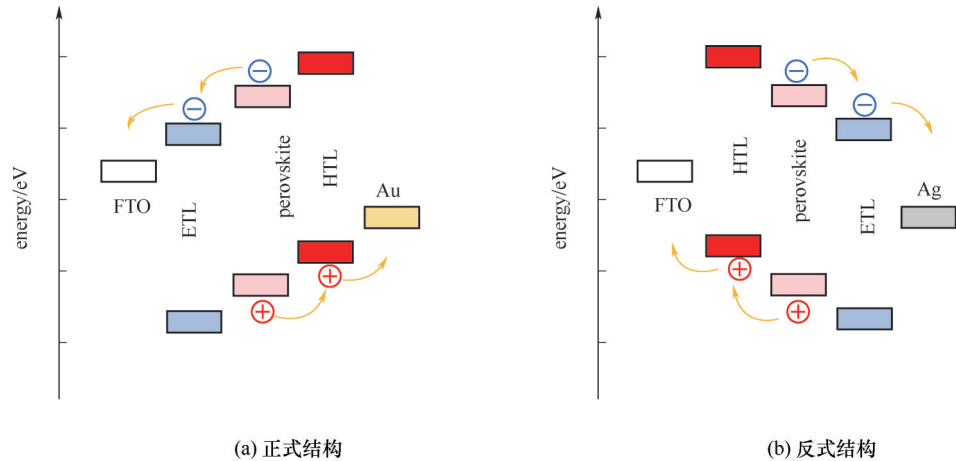


图7 太阳能电池能级和载流子移动方向: 正式结构(a); 反式结构(b)

Figure 7 Solar cell's energy level and carrier moving direction: Normal architecture (a); Inverted architecture (b)

动的载流子。钙钛矿太阳能电池的基本能级排列与电荷转移机制如图7所示。钙钛矿层面临的主要挑战是 V_{oc} ，这大多源于电荷的复合现象，包括辐射复合与非辐射复合^[32]。在钙钛矿太阳能电池中，电荷复合主要发生在钙钛矿层，通常通过提升钙钛矿薄膜性能来优化，方法包括插入钝化层和缓冲层等^[33]。

钙钛矿材料凭借带隙的可调性，在电池结构中展现了卓越的灵活性。依据带隙宽度的差异，钙钛矿可被划分为宽带隙、中带隙及窄带隙三类。对于钙钛矿太阳能电池而言，带隙的调节主要通过调整B位和X位元素的占比及替换来实现。尽管A位的替换对材料能带的影响相对较小，但它能显著提升材料的稳

定性^[34]。通常，宽带隙钙钛矿指的是带隙超过1.70 eV的材料，通过增加溴离子(Br⁻)或氯离子(Cl⁻)的比例，或用部分铯(Cs)替代有机阳离子，均可有效拓宽带隙。宽带隙钙钛矿能够提供更高的 V_{oc} ，因此，在多结或叠层太阳能电池中，它常被用作顶部吸收层，以更有效地捕获短波长光子，减少热化损失^[35]。Gu等^[36]提出密闭空间升华法，将溶液法制备的PbX₂(X代表I、Br和Cl)薄膜置于甲基碘化胺(MAI)蒸气中，通过气固反应实现卤素置换，生成大颗粒，从而使PSC($E_g = 1.71$ eV)的最大PCE达到了17.9%。此外，部分宽带隙钙钛矿还能以半透明形式设计，这使其非常适合应用于建筑一体化光伏系统或其他需要透光性

的场合^[37]。

中带隙钙钛矿材料通常指的是带隙介于 1.4~1.70 eV 之间的钙钛矿, 这类材料往往基于纯铅卤化物钙钛矿体系, 但也可通过掺杂少量锡离子(Sn^{2+})或其他元素来微调带隙^[38]。例如, APbI_3 (其中 A 为 FA^+ 、 MA^+ 、 $\text{Cs}_x\text{FA}_{1-x}^+$ 等)便是一种典型的中带隙钙钛矿, 这类材料既能有效吸收可见光范围内的光子, 又保持了相对较高的开路电压。它们既可单独用于制造高效的单结太阳能电池, 也适合作为叠层电池中的中间层, 以优化整个器件的转换效率^[39]。窄带隙钙钛矿则是指带隙小于 1.4 eV 的钙钛矿材料, 常通过引入锡离子(Sn^{2+})替代部分铅离子(Pb^{2+}), 形成 Sn-Pb 二元合金钙钛矿, 如 $\text{FA}_x\text{Cs}_{1-x}\text{Sn}_y\text{Pb}_{1-y}\text{I}_3$ ^[40]。此外, 改变卤素成分比例或添加其他微量元素也是调节带隙的有效方法。窄带隙钙钛矿在近红外区域具有更好的光子吸收能力, 这有利于其在全钙钛矿叠层电池中的应用^[41]。Zhao 等^[42]引入窄带隙的有机半导体 IEICO-4F 作为路易斯碱, 与 Pb^{2+} 离子(路易斯酸)相互作用, 有效钝化表面陷阱, 减少陷阱密度, 提高载流子迁移率。器件在 700~850 nm 范围内的响应显著增强。带隙调节的范围及作用如图 8 所示。

通过将多个光电转换层叠加制备而成的太阳能电池是钙钛矿应用的一种重要形式, 每个光电转换层通常由不同材料构成, 通过吸收不同波长范围的光谱将光能转化为电能^[45]。顶部电池带隙较宽, 可吸收高能量光子, 产生高的 V_{oc} , 而底部电池带隙较窄, 可吸收长波长光子, 减少光热损失, 提高 PCE^[46]。目

前叠层电池结构主要包括全钙钛矿叠层电池、钙钛矿/硅叠层电池和钙钛矿/有机叠层电池。为解决全钙钛矿电池中锡(Sn)的氧化问题, Zhang 等^[47]筛选出琥珀酸(AA)作为添加剂, 其羧基可以与 Sn^{2+} 强烈配位, 增强 Sn—I 键并减少缺陷, 抑制光诱导 I_2 的形成和 Sn^{2+} 的氧化。在此基础上, 引入了还原性硫醇基团抑制 Sn^{4+} 的形成, 提高空气稳定性并保持较强的光稳定性。Yu 等^[48]研究了一种新型的吸电子有机配体——氯甲基磷酸(CMP), 显著提高了锡铅混合钙钛矿的抗氧化能力, 减少了非辐射复合损失, 提高了载流子传输效率。对于叠层结构电池来说, 各功能层间的表面缺陷更为严重, Yang 等^[49]通过引入乙二胺二碘化物(EDA I_2)和(3-巯基丙基)三甲氧基硅烷(MPTS), 钝化表面缺陷来提升电池的性能, 这减少了非辐射复合损失并提高了载流子的传输效率。

钙钛矿/硅串联太阳能电池具有比单结硅电池更高的理论效率极限, 有望显著降低光伏发电的成本, 使其在能源市场中更具竞争力。通过将钙钛矿与硅电池结合, 可以突破单结硅电池效率的瓶颈, 同时利用现有硅电池产业的基础, 加速新技术的商业化进程。Allen 等^[50]通过理论分析和实验探究, 评估了钙钛矿顶电池的外部辐射效率对整体电池效率的影响, 通过在钙钛矿顶电池中使用甲基二氯化二铵(MDACl_2)等添加剂, 改善了钙钛矿薄膜的质量, 提高了电池的 FF 和 V_{oc} 。Li 等^[51]通过使用多功能化的哌嗪氯化物进行后处理, 有效改善了钙钛矿顶电池顶部界面和埋底界面的缺陷钝化和能带匹配。利用哌嗪氯化物的阳离

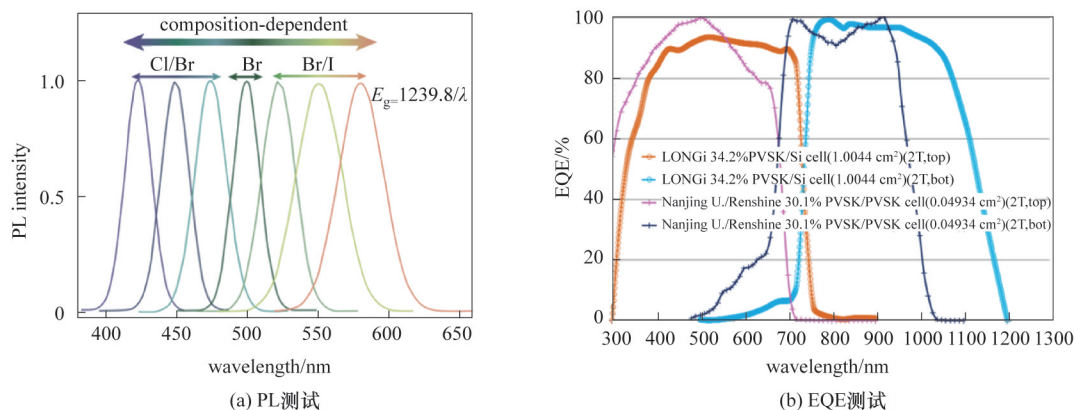


图8 太阳能电池带隙调节作用: PL 测试(a); EQE 测试(b)^[43-44]

Figure 8 Band-gap adjustment of solar cell. PL measure (a); EQE measure (b)^[43-44]

子倾向于集中在钙钛矿的顶部表面,减少非辐射复合并改善能带对齐;而氯离子则迁移到埋底界面,修复缺陷并减少能量偏移。

钙钛矿/有机叠层太阳能电池(PO-TSCs)在高效光伏器件、可穿戴电子设备和半透明建筑集成光伏等领域具有广泛的应用前景。然而,混合卤化物钙钛矿中的卤化物分层和能量损失问题限制了其性能和稳定性。Chen等^[52]利用阳离子合金化策略,在钙钛矿中引入咪唑阳离子(IA)调节晶格特性和钝化缺陷,实现了均匀的卤化物分布和显著降低的缺陷密度。Jiang等^[53]引入环己烷1,4-二铵二碘化物(CyDAI2)的顺反异构体作为钝化剂,研究了顺式和反式CyDAI2在钙钛矿表面的不同行为,最终减少宽禁带钙钛矿太阳能电池中的电压损失,从而提高钙钛矿-有机叠层太阳能电池的整体性能。Liu等^[54]使用[2-(9H-咔唑-9-基)乙基]磷酸(2PACz)改性聚(3,4-乙烯二氧噻吩):聚(苯乙炔磺酸)(PEDOT:PSS)作为互联层(ICL)中的HTL,这有助于电荷载流子的提取,减少ICL中的电荷载流子复合,并实现了更薄的PEDOT:PSS以减少寄生吸收。He等^[55]通过使用吡啶溴化物(PBP)与钙钛矿层之间的氢键和配位相互作用协同抑制了离子迁移,并使用V₂O₅优化ICL结构实现更低的损耗界面,增强对近红外光的透射,减少了能量损失。Wu等^[56]通过开发四元有机体异质结(BHJ)混合物来增强电池中的电荷提取,使用了(4-(3,6-二甲基-9H-咔唑-9-基)丁基)磷酸(Me-4PACz)与有机BHJ结合,形成MoO_x/SAM界面,以降低能量势垒并促进电荷收集。

HTL在提升光伏器件性能方面发挥着关键作用,它能有效分离光激发产生的电子-空穴对,并将空穴传输至外部电路。当前,HTL的制备主要依赖于有机材料,同时,对无机材料的应用探索也在逐步展开。在有机材料领域,2,2,7,7-四(*N,N*-二甲氧基苯胺)9,9-螺二芴(Spiro-MeOTAD)作为HTM应用于正式PSCs的制备已引起了广泛关注^[57]。然而,由于氧化态不足,直接使用Spiro-OMeTAD会使PCE表现不佳。采用Spiro-MeOTAD制备的钙钛矿太阳能电池器件需通过额外的氧化工艺才能获得理想的光伏性能^[58]。Liu等^[59]以二辛基芴为 π 桥引入甲氧基二苯胺取代的咔唑,在未掺杂的PSCs中表现出高热稳定性、

匹配的能级和高性能,这种优异性能还是在没有预氧化的情况下所实现。为提高HTL的导电性并抑制其与钙钛矿界面上的载流子复合,研究者们通过掺杂剂修饰HTL进行了大量研究,例如在Spiro-MeOTAD中添加锂盐、钴盐和吡啶衍生物等,这些措施均进一步提升了HTM的性能。但使用添加剂的同时,也引入了新问题,如吡啶衍生物对钙钛矿材料具有一定的腐蚀性,导致光伏性能、再现性和稳定性方面出现较大差异^[60]。

除Spiro-MeOTAD以外,常见的HTL还包括聚(3,4-乙烯二氧噻吩):聚(苯乙炔磺酸)(PEDOT:PSS)、聚(3-己基噻吩)(P3HT)和聚[双(4-苯基)(2,4,6-三甲苯基)胺](PTAA)等。PEDOT:PSS能够有效地提取和传输空穴,在可见光范围内具有较高的透明度,不会显著影响钙钛矿层的光吸收^[61]。分子结构简图如图9所示。Li等^[62]对PEDOT:PSS薄膜进行水洗处理后,仅留下一层超薄的PEDOT:PSS单层。PSS链通过In—O—S化学键与ITO表面结合,PEDOT则通过库仑相互作用位于PSS之上,形成双层结构。双层结构产生从带正电的PEDOT到带负电的PSS的定向电场,这加速了空穴的提取过程,提高空穴传输效率。PEDOT:PSS的使用会使自身磺酸基团与Pb²⁺产生配位作用,导致 V_{oc} 损失较高,限制了器件性能的进一步提升。Wu等^[63]在PEDOT:PSS薄膜中掺杂柠檬酸钾(PC),利用K⁺离子和柠檬酸根(citrate group)调节界面化学相互作用,提高钙钛矿太阳能电池的性能。PC中的K⁺捕获自由I⁻,而剩余的Pb²⁺与柠檬酸根配位,形成稳定的化学结构,减少界面处的缺陷态,抑制非辐射复合,提高 V_{oc} 。PEDOT:PSS空穴传输层还存在低导电性和PSS含量过高的问题,导致钙钛矿层的形貌和电学性能不佳。Qiao等^[64]使用乙二醇和甲醇对PEDOT:PSS进行后处理,乙二醇与PSS形成氢键,屏蔽了PEDOT和PSS之间的离子相互作用,甲醇处理去除表面的PSS有助于生长更大的钙钛矿晶粒,减少了晶界缺陷,提高了电荷载流子的寿命和迁移率。Zhao等^[65]引入分子MPA2FPh-BT-BA(简称2F),在ITO表面自组装形成界面偶极层,改变电极功函数和空穴选择性提取特性。2F还可以与PSS形成氢键,改善PEDOT:PSS的聚集特性,提高其导

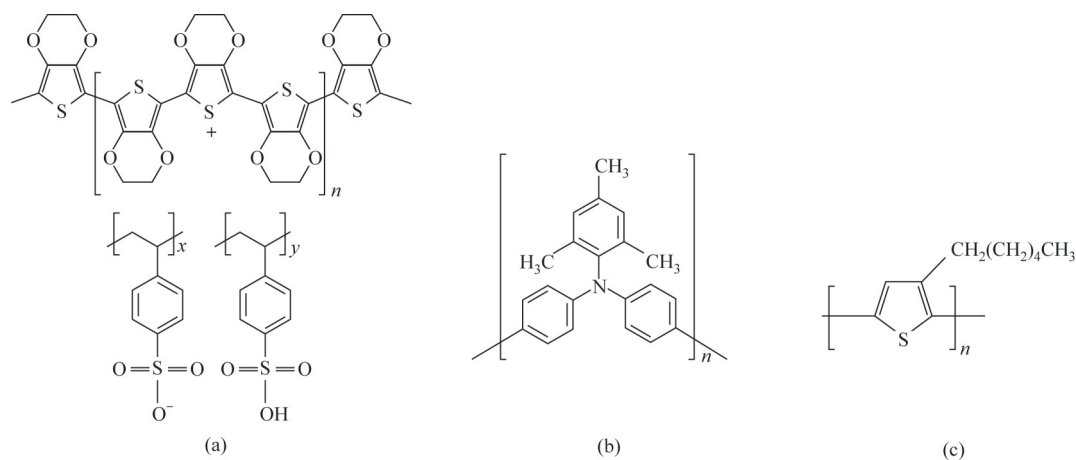


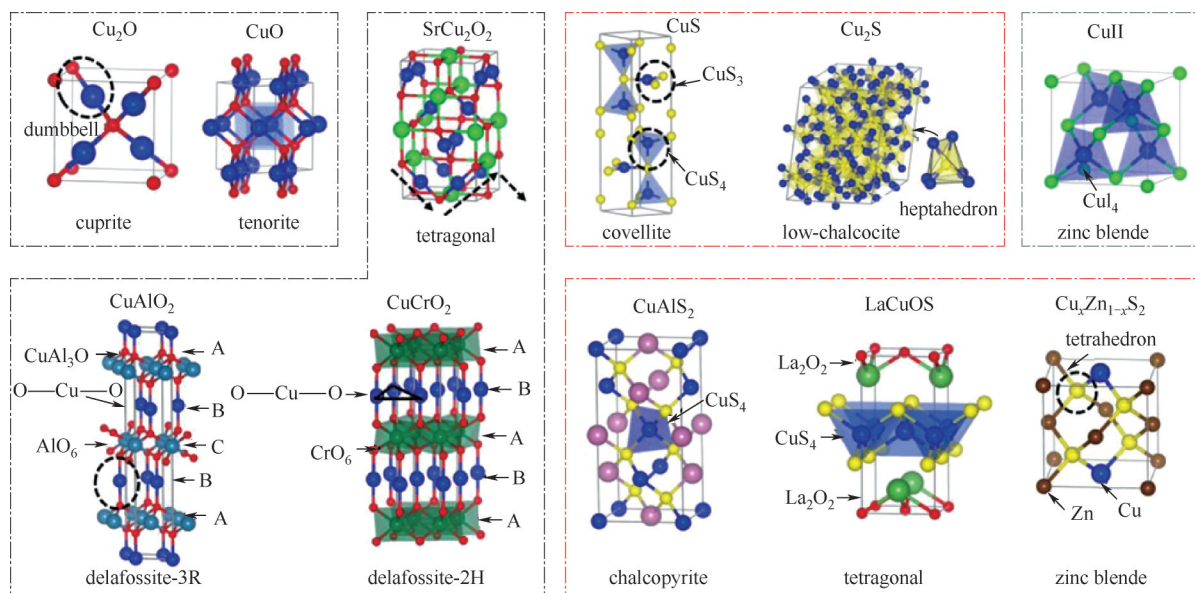
图9 PEDOT:PSS(a)、PTAA(b)和P3HT(c)的分子结构图^[73]

Figure 9 Molecular structure diagrams of PEDOT:PSS(a), PTAA(b) and P3HT(c)^[73]

电性。Wang 等^[66]引入一种超薄的 PTAA 层作为钙钛矿层和 PEDOT:PSS 层之间的界面修饰层来钝化界面和晶界缺陷。PTAA 同样可单独用于 HTL 的制备, 因其具有优异的空穴迁移率, 能够有效地提取和传输空穴, 减少空穴与电子的复合, 提高电池的 J_{sc} 和 FF^[67]。Yaghoobi Nia 等^[68]通过调节 PTAA 的分子量并结合掺杂策略, 优化了 n-i-p 结构钙钛矿太阳能电池中的空穴传输层。高分子量和掺杂共同作用下, PTAA 中的极化子离域化增强, 降低了电荷载流子的复合损失, 提高了电荷迁移率。PTAA 虽然能有效提高 NiO_x 的空穴传输能力和阻碍其与钙钛矿的界面反应, 但其自身的能量无序和高疏水性会影响电荷传输和钙钛矿薄膜的形成, 限制电池效率和稳定性的进一步提升。Wang 等^[69]引入 2,6-二氟-3-硝基苯腈 (FCNO_2) 与 PTAA 之间形成 π - π 相互作用促进了电荷转移, 增强了 PTAA 的 p 型特性, 提高了空穴迁移率和能级对齐。此外, FCNO_2 与 PbI_2 之间的强相互作用促进了钙钛矿晶体的缓慢生长, 增加了晶粒尺寸和结晶度, 减少了缺陷, 从而提高了电池的效率 and 稳定性。P3HT 同样具有较高的空穴迁移率, 能够有效地传输空穴, 减少复合损失, 并具有良好的柔韧性和溶液加工性, 适用于柔性基底和大面积器件的制备^[70]。Xu 等^[71]通过构建分子桥 MDN 来改善 P3HT 与钙钛矿之间的接触。MDN 通过马来酰亚胺基团与钙钛矿表面的 Pb^{2+} 离子形成静电耦合, 同时其三苯胺基团与 P3HT 形成紧密的 π - π 堆叠, 在钙钛矿

与 P3HT 之间构建电荷传输通道。这不仅改善了界面接触, 还钝化了钙钛矿表面的缺陷, 减少了复合, 提高了电池的效率 and 稳定性。P3HT 分子的取向和能级匹配问题导致与钙钛矿层的电荷传输效率低下, 限制了器件的性能。Tong 等^[72]将 PTAA 引入 P3HT 中, 增加了 P3HT 的面-on 取向和 π - π 堆叠, 形成了更高效的电荷传输通道。采用 P3HT 和 PTAA 协同增强的电池在室外光照下效率超过 21%, 在室内光照下效率超过 35%。

自组装单层(self-assembled monolayer, SAM)分子因其在优化电荷转移过程和增强 PSCs 界面方面的性能优势而备受瞩目。SAM 分子主要由锚定基团、连接基团和端基组成, 通过引入各种官能团或原子调整表面能级、减少界面缺陷, 实现其对钙钛矿层的修饰达到提升钙钛矿薄膜质量和防止器件退化的效果^[74]。例如, Dai 等^[75]采用碘末端自组装单层(I-SAM)通过卤素键与 PVK 表面形成更强的键合, 显著提高了界面黏附韧性, 进而提升了机械可靠性。Almasabi 等^[76]使用[2-(3,6-二甲氧基-9H-吡啶-9-基)乙基]磷酸 (MeO-2PACz) 作为 SAM 功能层, 在亲水性表面上成功得到 $\text{FA}_{0.6}\text{MA}_{0.4}\text{PbI}_3$ 钙钛矿单晶, 相比传统的 PTAA 具有更强的结合力, 提高了钙钛矿晶体与基底之间的附着力。Zhang 等^[77]将 Br-4PADBC 作为辅助组分引入到 MeO-2PACz 的 SAM 中, 形成互补的双组分 SAM(bi-SAM), 增强倒置 PSCs 的空穴传输能力。Br-4PADBC 的非平面 DBC 核心和两个 Br 原子是创新

图10 铜基HTL材料分子结构图^{[82]5}Figure 10 Molecular structure diagram of copper based HTL material^{[82]5}

的关键。非平面结构增加了分子的偶极矩, 显著提高ITO的功函数, 实现了与钙钛矿价带能级更好地对齐。Br原子的引入不仅增强了与未配位 Pb^{2+} 离子的配位相互作用, 改善了钙钛矿薄膜的结晶质量, 还有效钝化了钙钛矿的缺陷, 减少了非辐射复合。将Br-4PADBC与MeO-2PACz结合形成的bi-SAM, 不仅保留了MeO-2PACz的高电导率, 确保了高效的空穴提取, 还通过Br-4PADBC的高偶极矩进一步优化了能级对齐。Zhou等^[78]通过引入多功能有机材料2-(甲硫基)-4,5-二氢-1H-咪唑铵碘化物(MTIm), 与残留的 PbI_2 反应, 形成一维(MTIm) PbI_3 小晶粒, 实现了对PSCs顶部和埋藏界面的双重界面钝化。MTIm材料可以同时作为Lewis酸和Lewis碱来钝化钙钛矿表面的正/负电荷缺陷位点, 抑制了非辐射复合和缺陷诱导的不稳定性。SAMs在常用textured基底(如ITO、FTO等)上的不均匀覆盖会引入额外的界面损耗和器件不稳定性, 特别是在大面积器件的制备中, SAMs的不完全覆盖和不均匀沉积是一个亟待解决的问题。Fu等^[79]通过过氧化氢/紫外线浴在基底上植入—OH基团, 以增强和均质化SAMs的沉积, 从而获得更高质量的钙钛矿薄膜和更优越的埋底界面接触, 为大规模生产和可扩展制造提供新的可能。

HTL的厚度对载流子收集效率和光收集效率具有重要影响。Tress等^[80]发现, 最佳HTL厚度约为200 nm且不超过400 nm, 以避免电荷复合现象的发生。为克服有机材料的诸多问题, 研究者们探索了各种无机p型半导体材料作为PSCs中的HTL。无机材料同样可通过旋涂、电沉积、磁控溅射、电子束蒸发等工艺制膜, 且在反式器件的制备工艺上与有机材料工艺相兼容。相较于有机材料的HTL, 无机材料能更有效地抑制水/氧对器件的影响, 避免离子迁移通道的形成, 从而进一步提升PSCs的稳定性。目前所使用的无机空穴材料多以共价键相连接, 主要以镍基和铜基氧化物为主^[81]。镍基氧化物具有宽带隙、高透射率和深价带等优势, 且制膜工艺相对简单。但该材料空穴电导率较低, 且易与钙钛矿层形成不良接触。铜基氧化物则具备深价带、高载流子迁移率、良好的热稳定性和高透射率。然而, 其带隙能量相对较低, 光学损失较为严重^[82]。部分铜基HTL材料的分子结构如图10所示。此外, Khan等^[83]还研究了铜掺杂氧化镍($\text{NiO}:\text{Cu}$)基PSCs性能与铜掺杂比例(RCu/Ni)和退火温度的关系, 通过调整Cu掺杂比例(0、5%和10%)和退火温度(300°C、350°C和400°C), 来优化PSCs的各项性能。

3 钙钛矿太阳能电池应用的关键问题

3.1 大面积制备

到目前为止, 性能表现最佳的器件多为小面积器件。钙钛矿太阳能电池的实验室制造工艺尚难以直接应用于钙钛矿太阳能组件, 在扩大尺寸的同时保持高效率, 已成为其商业化进程中的主要攻关点。当前, 小面积器件的PCE纪录已达到26.7%^[84]。当器件面积扩展至1 cm²时, PCE便降至24.67%。若继续增大面积, 效率损失将更为显著, 例如, 面积达到810 cm²的器件, 其PCE记录已下滑至19.9%^[9,85]。要推动钙钛矿太阳能电池的商业化应用, 必须解决薄膜在大面积制备时的均匀性和致密性等关键问题。同时, 降低成本也是实现这一目标的重要因素。此外, 采用可扩展的制造方法扩大薄膜面积时, 钙钛矿薄膜的不均匀性问题会进一步加剧。因此, 深入理解钙钛矿晶体的生长与形成机制, 对于通过可扩展制造技术获得高质量、均匀的大面积钙钛矿薄膜至关重要。

3.2 长期稳定性

尽管钙钛矿太阳能电池已展现出卓越的性能, 但其长期稳定性仍是亟待攻克的关键难题。钙钛矿吸收层的晶体形态对其稳定性具有显著影响。采用溶液沉积技术制备的3D钙钛矿薄膜时, 可能出现表面覆盖不均或产生裂纹等缺陷。这些不良形态不仅会降低薄膜的光捕获效率, 还可能使水分侵入, 进而影响太阳能电池的效率和稳定性^[86]。此类薄膜缺陷还为卤化物阴离子(I⁻)的迁移及有机阳离子(如甲基铵MA⁺、甲脒FA⁺)从钙钛矿吸收层逃逸提供了可能^[87]。这些现象不仅引发太阳能电池中的 $J-V$ 迟滞效应, 还会加速表面及多功能层的降解, 尤其是小晶粒和高表面缺陷密度的薄膜, 其降解速度更为显著。此外, 边界区域因电子密度较高, 会加速超氧化物的形成, 在边界附近诱发降解过程^[88]。

除钙钛矿材料自身的稳定性挑战外, 钙钛矿太阳能电池对水和氧气等环境因素也颇为敏感, 这些外界条件易对其性能造成不利影响, 导致效率下滑。基于此, Khenkin等^[89]依据国际有机光伏稳定性峰会

(ISOS)协议, 提出了针对PSCs特性的新测试程序, 并建议在出版物中详细报告关键测试信息, 以提升实验的可重复性, 促进大数据的收集与分析, 为后续机器学习在钙钛矿太阳能电池计算、模拟等方面的应用奠定坚实基础。表1汇总了针对钙钛矿太阳能电池测试协议的附加建议。表中的 V_{oc} 、 V_{MPP} 和 J_{MPP} 是根据新协议在标准太阳能电池测试条件下所测得的相应参数; E_g 代表有源层的带隙; q 为基本电荷。表中术语解释如下: 环境(environmental, Env.); 开路状态(open-circuit condition, OC); 最大功率点(maximum power point, MPP); 室温(room temperature, RT); 相对湿度(relative humidity, RH)。

Li等^[90]依据国际有机光伏稳定性峰会协议ISOS-D-1的测试标准, 探究了倒置PSCs的稳定性。在长达1700 h的测试中, PCE的下降主要归因于FF和 J_{sc} 的衰退。Li等^[91]则遵循ISOS-L-2I协议, 在65°C连续光照条件下进行测试, 经过1960 h的最大功率点(MPP)跟踪后, 封装的PSCs仍保持了初始PCE的95.4%。Lu等^[92]采用ISOS-L-3协议, 在约65°C、相对湿度约50%的环境下跟踪MPP, 处理后的PSCs在300 h老化测试后维持了97%的原始PCE。统一的测试评价标准将增强行业内测试的趋同度, 便于结果对比与总结, 为技术发展提供了精确的参考基准。

PSCs的降解现象对封装方法提出了要求, 良好的封装, 如通过保护层或器件密封, 能提升PSCs的稳定性和寿命。Khenkin等学者在共识声明中未提及“封装模块特有的压力测试”(涵盖冰雹测试及潜在诱导退化等)的进一步优化方案, 但他们展望这些测试未来或将遵循现有的IEC 61215标准。Hasan等^[93]指出, 外部封装需防潮、防杂质侵入及防机械损伤, 同时作为电池、互连及其他组件间的绝缘体, 并将电池组件整合在一起。尽管外部封装减轻了外部老化和引线泄漏问题, 但PSCs器件内部离子迁移导致的性能下降仍待解决。Li等^[94]选用聚四氟乙烯作为倒置PSCs中钙钛矿薄膜与电子传输层间的有效内部封装层, 实现电子的选择性传输并抑制离子扩散, 使PSCs效率达到25.49%。Choi等^[95]则利用聚合物环氧固化反应对晶界进行原位微胶囊化处理[见图11(a)], 在PVK晶界构建保护屏障, 微胶囊既作为缺陷钝化

表1 考虑钙钛矿材料和器件特性的ISOS协议建议^{[89]38}Table 1 ISOS protocol recommendations considering the characteristics of perovskite materials and devices^{[89]38}

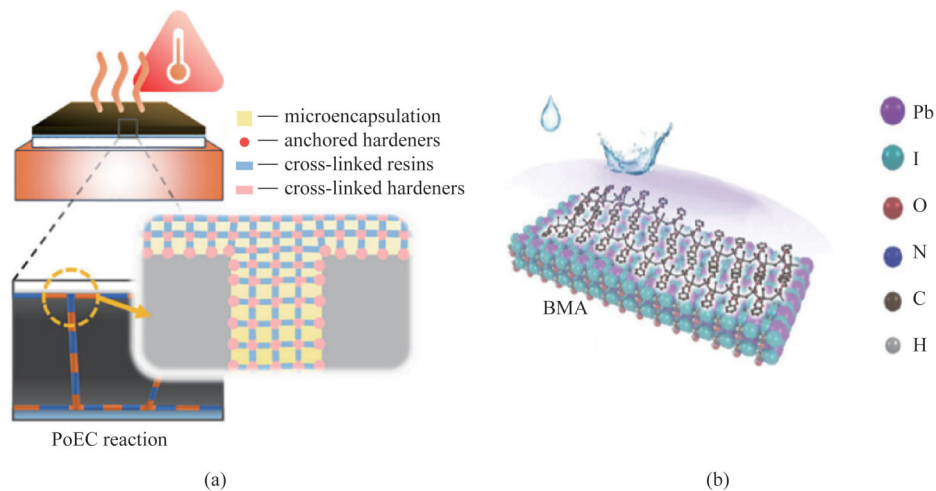
Test ID	Light source	Temperature	Rel. humidity	Env./Set-up	Characterization light source	Load
bias stability (ISOS-V)						
ISOS-V-1	none	ambient (23 ± 4°C)	ambient	ambient air	solar simulator	positive: $V_{MPP}, V_{oc};$ $E_g/q, J_{sc};$
ISOS-V-2	none	65,85°C	ambient	oven, ambient air	solar simulator	negative:
ISOS-V-3	none	65,85°C	85%	env. chamber	solar simulator	$-V_{oc}, J_{MPP}$
light cycling (ISOS-LC)						
ISOS-LC-1	solar simulator / dark cycle period: 2 h, 8 h, or 24 h duty	ambient (23 ± 4)°C	ambient	light only	solar simulator	MPP or OC
ISOS-LC-2	cycle: 1 : 1 or 1 : 2	65,85°C	ambient	light & temperature	solar simulator	MPP or OC
ISOS-LC-3		65,85°C	< 50%	light, temperature & RH	solar simulator	MPP

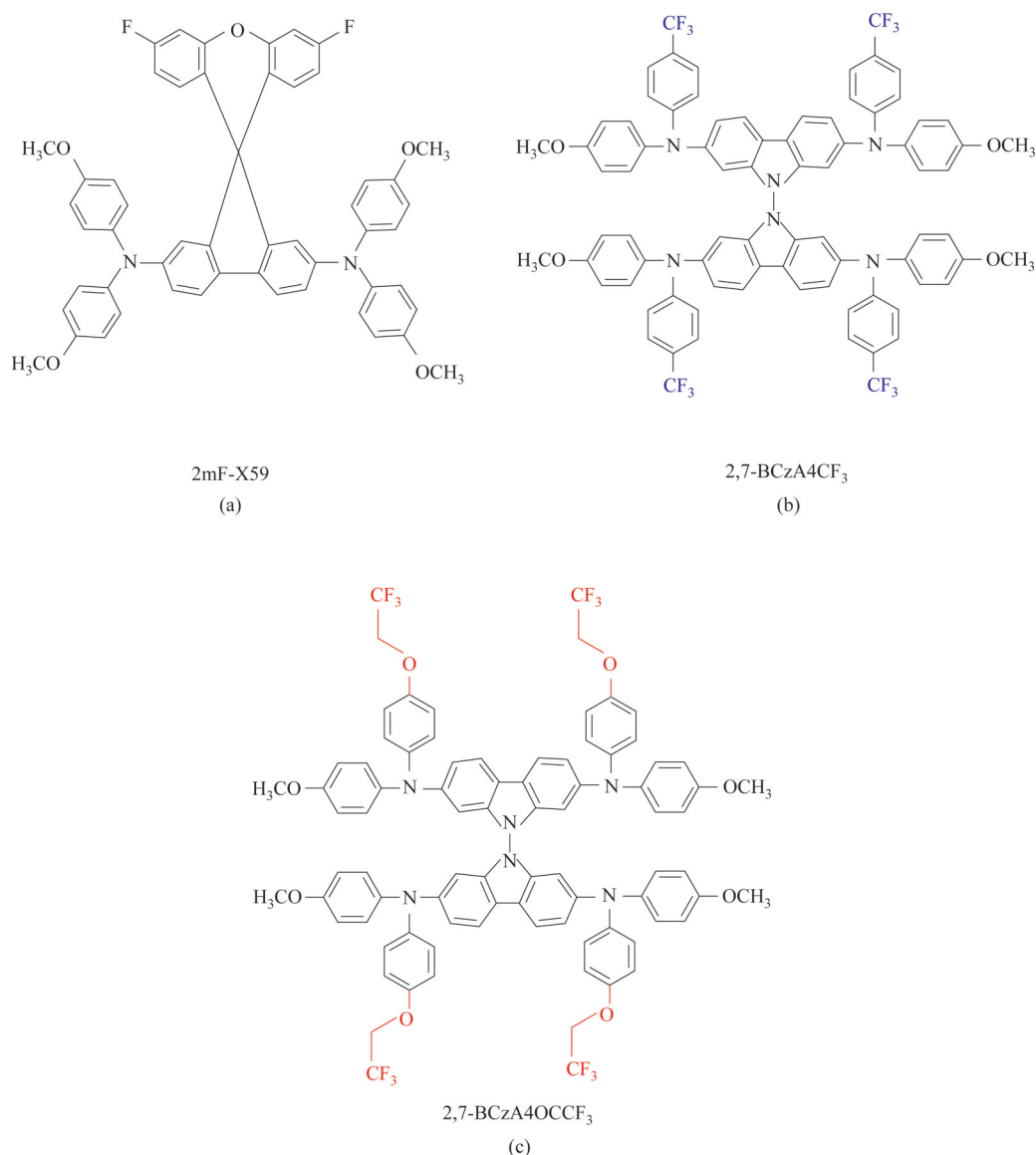
的主要屏障, 又作为次级聚合物间隔物, 有效隔绝水分子。Yang等^[96]通过自交联和 π 效应实现内部封装升级, 将线性保护转变为紧凑的网状结构[见图11(b)], 不仅将效率提升至25.31%, 还显著增强了PVK的稳定性, 尤其是防水性能。

研究HTL同样是一种防止PSCs降解的重要方向, 在正式结构中HTL位于金属电极和钙钛矿层中间, 是防止水分和氧气进入钙钛矿层的有效屏障之一。常用的HTMs为Spiro-MeOTAD, 但其合成工艺复杂且成本较高, 使用过程中需要添加掺杂剂等问题

影响了后续的工业化应用。Guo等^[97]报道了一种低成本的氟化螺[茛-9,90-氧杂蒽]基HTM, 分子结构如图12(a)所示。引入氟元素显著提升了HTL的疏水性, 其水接触角测试结果达100.3°。在此基础上, 该团队引入三甲基氟基团($-CF_3$)进一步增强HTL的疏水性, 分子结构如图12(b)所示。考虑到分子结构, 使用非共轭烷氧基桥接 $-CF_3$ 基团[分子结构如图12(c)所示], 进一步增加了材料的疏水性, 两种HTM的水接触角度分别为102.8°和108.3°^[98]。

采用外部封装能有效阻隔尘杂等物质的侵入, 而

图11 PSC内部封装示意图^[95-96]Figure 11 Schematic diagram of PSC internal packaging^[95-96]

图12 HTL分子结构示意图^[97-98]Figure 12 Schematic diagram of HTL molecular structure^[97-98]

内部封装则可同步减少非辐射复合、抑制水分子渗透及离子迁移等现象。优质的封装技术是制备高效稳定PSCs的关键且不可或缺的一环。对于封装工艺的优化仍需深入探索,在提升效率、降低成本的同时,进一步增强PSCs的稳定性。

3.3 环境污染和毒性问题

目前,主流的钙钛矿体系仍以铅系为主,铅的毒性问题不容忽视。铅泄漏对人类健康及水资源构成的

威胁,是钙钛矿太阳能电池发展进程中亟待解决的关键问题。封装技术虽能在一定程度上减少铅泄漏的风险,但唯有深入研究无铅材料,方能从根本上消除毒性隐患^[99]。为解决钙钛矿太阳能电池的毒性难题,研究者们正探索用其他元素完全或部分取代铅,以期有效降低环境污染及器件毒性。在众多候选材料中(例如Sn、Bi、Sb、Ge),锡基钙钛矿展现出作为铅替代品的巨大潜力^[100]。当前,铅基前体多用于混合或无机PSCs中,其效率已接近15%,正逐渐成为环保

且低成本的薄膜太阳能电池的有力竞争者。然而, 对于锡基PSCs而言, 提升光电转换效率是一大挑战, 同时, 锡钙钛矿的稳定性也是亟需解决的另一关键问题。Yu等^[10]综述了不同类别无铅钙钛矿及类钙钛矿材料的维度变化, 并指出维度是影响无铅PSCs性能的关键因素之一。因此, 推动无铅材料的进一步发展仍面临诸多挑战。

4 结语

本文系统梳理了钙钛矿太阳能电池(PSCs)的发展与问题, 重点探讨了其在材料科学、界面优化、制造工艺以及实际应用中所面临的挑战。发现如下。

首先, 钙钛矿太阳能电池作为一种新型光伏技术, 以其高效的光电转换效率和较低的制造成本, 在光伏领域展现出了巨大的潜力。实验室中PSCs的光电转换效率已突破26%, 为商业化应用奠定了坚实基础。

其次, 钙钛矿材料的独特性质, 如高光吸收系数和低载流子复合概率, 为其高效的光电转换提供了可

能。通过材料科学和界面优化的研究, 研究者们不断优化钙钛矿材料的性能, 提高薄膜质量, 进而提升PSCs的整体效率。在器件制备工艺方面, 旋涂法、真空辅助沉积等多种方法被广泛应用, 每种方法都有其独特的优缺点。同时, 器件结构的创新也为PSCs的性能提升开辟了新的途径。退火工艺的优化对于提高PSCs的光电转换效率和稳定性也起到了关键作用。

然而, 钙钛矿太阳能电池在发展过程中也面临诸多挑战。大面积制备问题、稳定性问题以及环境污染和毒性问题都是制约其商业化进程的重要因素。特别是大面积制备过程中如何保持高效率, 以及钙钛矿材料对环境因素的敏感性, 都是当前研究的热点和难点。

展望未来, 随着材料科学和界面优化研究的深入, 钙钛矿太阳能电池的制备工艺将得到进一步优化, 转换效率将持续提升。同时, 封装技术的改进也将有助于提高PSCs的稳定性和使用寿命。此外, 无铅材料的研究将成为未来发展的重要方向, 有望从根本上解决毒性问题, 推动钙钛矿太阳能电池向更环保、更安全的方向发展。

参考文献

- [1] Celik I, Phillips A B, Song Z N, et al. Environmental analysis of perovskites and other relevant solar cell technologies in a tandem configuration[J]. *Energy & Environmental Science*, 2017, 10(9): 1874-1884.
- [2] 李保群, 康侍民, 段凯. 综述太阳能的几种利用方式[J]. *山西建筑*, 2007, 33(27): 14-16.
Li B Q, Kang S M, Duan K. Comprehensive and discussed several methods of using solar energy[J]. *Shanxi Architecture*, 2007, 33(27): 14-16.
- [3] Battaglia C, Cuevas A, De Wolf S. High-efficiency crystalline silicon solar cells: Status and perspectives[J]. *Energy & Environmental Science*, 2016, 9(5): 1552-1576.
- [4] Major J D. Grain boundaries in CdTe thin film solar cells: A review[J]. *Semiconductor Science and Technology*, 2016, 31(9): 093001.
- [5] Arutyunov V S, Lisichkin G V. Energy resources of the 21st century: Problems and forecasts. can renewable energy sources replace fossil fuels?[J]. *Russian Chemical Reviews*, 2017, 86(8): 777-804.
- [6] Cao F R, Bian L K, Li L. Perovskite solar cells with high-efficiency exceeding 25%: A review[J]. *Energy Materials and Devices*, 2024, 2(1): 9370018.
- [7] Zhou J J, Tan L G, Liu Y, et al. Highly efficient and stable perovskite solar cells *via* a multifunctional hole transporting material[J]. *Joule*, 2024, 8(6): 1691-1706.
- [8] Zhao S K, Hu K X, Huang M, et al. Optimization of capillary suspension silver pastes for enhanced metallization in silicon solar Cells: A comparative analysis of screen-printing and pattern transfer printing[J]. *Solar Energy*, 2024, 277: 112746.
- [9] The National Renewable Energy Laboratory. Best research-cell efficiency chart[EB/OL]. [2024-11-11]. <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>.

- [10] Lee T D, Ebong A U. A review of thin film solar cell technologies and challenges[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2017, 70: 1286-1297.
- [11] Belghachi A, Helmaoui A, Chekane A. High efficiency all-GaAs solar cell[J]. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2010, 18(2): 79-82.
- [12] Ramanujam J, Singh U P. Copper indium gallium selenide based solar cells: A review[J]. *Energy & Environmental Science*, 2017, 10(6): 1306-1319.
- [13] Poplawsky J D. Cadmium telluride solar cells: Record-breaking voltages[J]. *Nature Energy*, 2016, 1(3): 16021.
- [14] Kim J Y, Lee J W, Jung H S, et al. High-efficiency perovskite solar cells[J]. *Chemical Reviews*, 2020, 120(15): 7867-7918.
- [15] 周露露, 张馨月, 林春丹, 等. 钙钛矿材料: 热电领域的潜力之星[J]. *工程研究——跨学科视野中的工程*, 2024, 16(4): 375-389.
Zhou L L, Zhang X Y, Lin C D, et al. Perovskite materials: Potential star in the field of thermoelectricity[J]. *Journal of Engineering Studies*, 2024, 16(4): 375-389.
- [16] Stranks S D, Eperon G E, Grancini G, et al. Electron-hole diffusion lengths exceeding 1 micrometer in an organometal trihalide perovskite absorber[J]. *Science*, 2013, 342(6156): 341-344.
- [17] Rezaee E, Zhang W, Silva S R P. Solvent engineering as a vehicle for high quality thin films of perovskites and their device fabrication[J]. *Small*, 2021, 17(25): 2008145.
- [18] Seshiaiah K V, Kim J H. Nature of defects and their passivation engineering for advancements in perovskite solar cells[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2024, 492: 152370.
- [19] Garland J E, Crain D J, Zheng J P, et al. Electro-analytical characterization of photovoltaic cells by combining voltammetry and impedance spectroscopy: Voltage dependent parameters of a silicon solar cell under controlled illumination and temperature[J]. *Energy & Environmental Science*, 2011, 4(2): 485-498.
- [20] Ono L K, Park N G, Zhu K, et al. Perovskite solar cells: Towards commercialization[J]. *ACS Energy Letters*, 2017, 2(8): 1749-1751.
- [21] Jung K, Chae W S, Park Y C, et al. Influence of Lewis base HMPA on the properties of efficient planar MAPbI₃ solar cells fabricated by one-step process assisted by Lewis acid-base adduct approach[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2020, 380: 122436.
- [22] Xiao T, Hao M W, Duan T W, et al. Elimination of grain surface concavities for improved perovskite thin-film interfaces[J]. *Nature Energy*, 2024, 9(8): 999-1010.
- [23] Zhang W Y, Zhou Q S, Qiu J M, et al. Synergistic effects of the physical modification and chemical passivation enabling efficient perovskite solar cells[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2024, 497: 154864.
- [24] Li F Q, Huang X F, Ma C Q, et al. Tailoring the interface with a multifunctional ligand for highly efficient and stable FAPbI₃ perovskite solar cells and modules[J]. *Advanced Science*, 2023, 10(21): 2301603.
- [25] Han Y P, Xie H B, Lim E L, et al. Review of two-step method for lead halide perovskite solar cells[J]. *Solar RRL*, 2022, 6(6): 2101007.
- [26] Zhao Y, Ma F, Qu Z H, et al. Inactive (PbI₂)₂RbCl stabilizes perovskite films for efficient solar cells[J]. *Science*, 2022, 377(6605): 531-534.
- [27] Paliwal A, Zaroni K P S, Roldán-Carmona C, et al. Fully vacuum-deposited perovskite solar cells in substrate configuration[J]. *Matter*, 2023, 6(10): 3499-3508.
- [28] Li H, Zhou J J, Tan L G, et al. Sequential vacuum-evaporated perovskite solar cells with more than 24% efficiency[J]. *Science Advances*, 2022, 8(28): eabo7422.
- [29] You J B, Yang Y M, Hong Z R, et al. Moisture assisted perovskite film growth for high performance solar cells[J]. *Applied Physics Letters*, 2014, 105(18): 183902.
- [30] Xie F X, Zhang D, Su H M, et al. Vacuum-assisted thermal annealing of CH₃NH₃PbI₃ for highly stable and efficient perovskite solar cells [J]. *ACS Nano*, 2015, 9(1): 639-646.
- [31] Nyiekaa E A, Aika T A, Orukpe P E, et al. Development on inverted perovskite solar cells: A review[J]. *Heliyon*, 2024, 10(2): e24689.
- [32] Yan W B, Li Y L, Li Y, et al. High-performance hybrid perovskite solar cells with open circuit voltage dependence on hole-transporting materials[J]. *Nano Energy*, 2015, 16: 428-437.
- [33] Li H, Xie G S, Fang J, et al. Holistic dielectric and buffer interfacial layers enable high-efficiency perovskite solar cells and modules[J]. *Nano Energy*, 2024, 124: 109507.
- [34] Yang W S, Noh J H, Jeon N J, et al. High-performance photovoltaic perovskite layers fabricated through intramolecular exchange[J]. *Science*, 2015, 348(6240): 1234-1237.

- [35] Tong Y, Najjar A, Wang L, et al. Wide-bandgap organic-inorganic lead halide perovskite solar cells[J]. *Advanced Science*, 2022, 9(14): 2105085.
- [36] Gu L L, Wang S B, Fang X, et al. High-performance large-area perovskite solar cells enabled by confined space sublimation[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2020, 12(30): 33870-33878.
- [37] Rahmany S, Etgar L. Semitransparent perovskite solar cells[J]. *ACS Energy Letters*, 2020, 5(5): 1519-1531.
- [38] Peng W B, Zhang Y, Zhou X Y, et al. A versatile energy-level-tunable hole-transport layer for multi-composition inverted perovskite solar cells[J]. *Energy & Environmental Science*, 2025, 18(2): 874-883.
- [39] Isikgor F H, Li B C, Zhu H, et al. High performance planar perovskite solar cells with a perovskite of mixed organic cations and mixed halides, $\text{MA}_{1-x}\text{FA}_x\text{PbI}_{3-y}\text{Cl}_y$ [J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2016, 4(32): 12543-12553.
- [40] Green M A, Hishikawa Y, Warta W, et al. Solar cell efficiency tables (version 50)[J]. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2017, 25(7): 668-676.
- [41] Hu S F, Thiesbrummel J, Pascual J, et al. Narrow bandgap metal halide perovskites for all-perovskite tandem photovoltaics[J]. *Chemical Reviews*, 2024, 124(7): 4079-4123.
- [42] Zhao X M, Yao C, Liu T R, et al. Extending the photovoltaic response of perovskite solar cells into the near-infrared with a narrow-bandgap organic semiconductor[J]. *Advanced Materials*, 2019, 31(49): e1904494.
- [43] Zhang H, Pfeifer L, Zakeeruddin S M, et al. Tailoring passivators for highly efficient and stable perovskite solar cells[J]. *Nature Reviews Chemistry*, 2023, 7(9): 632-652.
- [44] Yang F J, Zhu K. Advances in mixed tin-lead narrow-bandgap perovskites for single-junction and all-perovskite tandem solar cells[J]. *Advanced Materials*, 2024, 36(31): 2314341.
- [45] Liu X X, Zhang J J, Tang L T, et al. Over 28% efficiency perovskite/Cu(InGa)Se₂ tandem solar cells: Highly efficient sub-cells and their bandgap matching[J]. *Energy & Environmental Science*, 2023, 16(11): 5029-5042.
- [46] Fang Z, Deng B R, Jin Y B, et al. Surface reconstruction of wide-bandgap perovskites enables efficient perovskite/silicon tandem solar cells [J]. *Nature Communications*, 2024, 15: 10554.
- [47] Zhang J Q, Wang J N, Zhou Q S, et al. Dual-source defect managing of tin-lead perovskite for efficient all-perovskite tandem solar cells[J]. *Advanced Functional Materials*, 2025, 35(8): 2415797.
- [48] Yu D N, Pan M L, Liu G Q, et al. Electron-withdrawing organic ligand for high-efficiency all-perovskite tandem solar cells[J]. *Nature Energy*, 2024, 9(3): 298-307.
- [49] Yang M, Bai Y, Meng Y Y, et al. Sn-Pb perovskite with strong light and oxygen stability for all-perovskite tandem solar cells[J]. *Advanced Materials*, 2025, 37(4): 2415627.
- [50] Allen T G, Ugur E, Aydin E, et al. A practical efficiency target for perovskite/silicon tandem solar cells[J]. *ACS Energy Letters*, 2025, 10(1): 238-245.
- [51] Li X, Ying Z Q, Li S, et al. Top-down dual-interface carrier management for highly efficient and stable perovskite/silicon tandem solar cells [J]. *Nano-Micro Letters*, 2025, 17(1): 141.
- [52] Chen M Q, Li Y X, Zeng Z X, et al. Regulating the crystallization of mixed-halide perovskites by cation alloying for perovskite-organic tandem solar cells[J]. *Energy & Environmental Science*, 2024, 17(24): 9580-9589.
- [53] Jiang X, Qin S C, Meng L, et al. Isomeric diammonium passivation for perovskite-organic tandem solar cells[J]. *Nature*, 2024, 635(8040): 860-866.
- [54] Liu S T, Hao L, Yu J K, et al. High-performance and stable perovskite/organic tandem solar cells enabled by interconnecting layer engineering[J]. *ACS Nano*, 2025, 19(1): 748-759.
- [55] He Z W, Yu R N, Dong Y M, et al. Minimized optical/electrical energy loss for 25.1% monolithic perovskite/organic tandem solar cells[J]. *Nature Communications*, 2025, 16: 1773.
- [56] Wu X, Zhang D, Liu B Z, et al. Optimization of charge extraction and interconnecting layers for highly efficient perovskite/organic tandem solar cells with high fill factor[J]. *Advanced Materials*, 2024, 36(49): 2410692.
- [57] Yin X X, Song Z N, Li Z F, et al. Toward ideal hole transport materials: A review on recent progress in dopant-free hole transport materials for fabricating efficient and stable perovskite solar cells[J]. *Energy & Environmental Science*, 2020, 13(11): 4057-4086.
- [58] Ouedraogo N A N, Odunmbaku G O, Guo B, et al. Oxidation of spiro-OMeTAD in high-efficiency perovskite solar cells[J]. *ACS Applied*

- Materials & Interfaces, 2022, 14(30): 34303-34327.
- [59] Liu X, Wang K X, Liu R Y, et al. D- π -D hole transport materials based on dioctylfluorene for highly efficient and stable perovskite solar cells without pre-oxidation[J]. Dyes and Pigments, 2022, 204: 110452.
- [60] Dong Y Y, Rombach F M, Min G H, et al. Dopant-induced interactions in spiro-OMeTAD: Advancing hole transport for perovskite solar cells[J]. Materials Science and Engineering: R: Reports, 2025, 162: 100875.
- [61] Kim K, Kim M, Lee H, et al. Multi-functional PEDOT: PSS as the efficient perovskite solar cells[J]. Small, 2024, 20(38): 2402341.
- [62] Hu L J, Li M, Yang K, et al. PEDOT: PSS monolayers to enhance the hole extraction and stability of perovskite solar cells[J]. Journal of Materials Chemistry A, 2018, 6(34): 16583-16589.
- [63] Wu F, Yan K R, Wu H T, et al. Tuning interfacial chemical interaction for high-performance perovskite solar cell with PEDOT: PSS as hole transporting layer[J]. Journal of Materials Chemistry A, 2021, 9(26): 14920-14927.
- [64] Reza K M, Gurung A, Bahrami B, et al. Tailored PEDOT: PSS hole transport layer for higher performance in perovskite solar cells: Enhancement of electrical and optical properties with improved morphology[J]. Journal of Energy Chemistry, 2020, 44: 41-50.
- [65] Zhao B, Huang X Z, Chung S, et al. Hole-selective-molecule doping improves the layer thickness tolerance of PEDOT: PSS for efficient organic solar cells[J]. eScience, 2025, 5(1): 100305.
- [66] Wang M, Wang H X, Li W, et al. Defect passivation using ultrathin PTAA layers for efficient and stable perovskite solar cells with a high fill factor and eliminated hysteresis[J]. Journal of Materials Chemistry A, 2019, 7(46): 26421-26428.
- [67] Bi H, Fujiwara Y, Kapil G, et al. Perovskite solar cells consisting of PTAA modified with monomolecular layer and application to all-perovskite tandem solar cells with efficiency over 25%[J]. Advanced Functional Materials, 2023, 33(32): 2300089.
- [68] Yaghoobi Nia N, Zendehelel M, Abdi-Jalebi M, et al. Beyond 17% stable perovskite solar module *via* polaron arrangement of tuned polymeric hole transport layer[J]. Nano Energy, 2021, 82: 105685.
- [69] Wang L, Yuan S H, Qian F, et al. Electrophilic molecule-induced π - π interactions reduce energy disorder of the hole transport layer for highly efficient perovskite solar modules[J]. Energy & Environmental Science, 2024, 17(21): 8337-8348.
- [70] Jung E H, Jeon N J, Park E Y, et al. Efficient, stable and scalable perovskite solar cells using poly(3-hexylthiophene)[J]. Nature, 2019, 567(7749): 511-515.
- [71] Xu D D, Gong Z M, Jiang Y, et al. Constructing molecular bridge for high-efficiency and stable perovskite solar cells based on P3HT[J]. Nature Communications, 2022, 13: 7020.
- [72] Tong J J, Dong C, Arnal V M, et al. Synergistic potentiation between P3HT and PTAA enables blade-coated carbon-electrode perovskite solar cells with >21% outdoor and >35% indoor efficiencies[J]. Chemical Engineering Journal, 2024, 501: 157577.
- [73] Sharma D, Mehra R, Raj B. Comparative study of hole transporting layers commonly used in high-efficiency perovskite solar cells[J]. Journal of Materials Science, 2022, 57(45): 21172-21191.
- [74] Suo J J, Yang B W, Bogachuk D, et al. The dual use of SAM molecules for efficient and stable perovskite solar cells[J]. Advanced Energy Materials, 2025, 15(2): 2400205.
- [75] Dai Z H, Yadavalli S K, Chen M, et al. Interfacial toughening with self-assembled monolayers enhances perovskite solar cell reliability[J]. Science, 2021, 372(6542): 618-622.
- [76] Almasabi K, Zheng X P, Turedi B, et al. Hole-transporting self-assembled monolayer enables efficient single-crystal perovskite solar cells with enhanced stability[J]. ACS Energy Letters, 2023, 8(2): 950-956.
- [77] Zhang S T, Jiang X F, Wang X, et al. Complementary self-assembled monolayers enabling improved energy level alignment in inverted perovskite solar cells[J]. Journal of Energy Chemistry, 2025, 104: 136-145.
- [78] Zhou C, Wang F, Ai X B, et al. Dual interfacial modification with 1D perovskite for self-assembled monolayer based inverted perovskite solar cells[J]. Nano Energy, 2024, 128: 109811.
- [79] Fu S, Sun N N, Chen H, et al. Homogenizing SAM deposition *via* seeding —OH groups for scalable fabrication of perovskite solar cells [J]. Energy & Environmental Science, 2025, 18(7): 3305-3312.
- [80] Marinova N, Tress W, Humphry-Baker R, et al. Light harvesting and charge recombination in $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ perovskite solar cells studied by hole transport layer thickness variation[J]. ACS Nano, 2015, 9(4): 4200-4209.
- [81] Zhou Y, Huang X Z, Zhang J S, et al. Interfacial modification of NiO_x for highly efficient and stable inverted perovskite solar cells[J]. Advanced Energy Materials, 2024, 14(25): 2400616.

- [82] Sun Q D, Sadhu A, Lie S, et al. Critical review of Cu-based hole transport materials for perovskite solar cells: From theoretical insights to experimental validation[J]. *Advanced Materials*, 2024, 36(31): 2402412.
- [83] Khan F, Rezgui B D, Kim J H. Analysis of PV cell parameters of solution processed Cu-doped nickel oxide hole transporting layer-based organic-inorganic perovskite solar cells[J]. *Solar Energy*, 2020, 209: 226-234.
- [84] Yoo J W, Jang J, Kim U, et al. Efficient perovskite solar mini-modules fabricated *via* bar-coating using 2-methoxyethanol-based formamidinium lead tri-iodide precursor solution[J]. *Joule*, 2021, 5(9): 2420-2436.
- [85] Kim J, Yun J S, Cho Y, et al. Overcoming the challenges of large-area high-efficiency perovskite solar cells[J]. *ACS Energy Letters*, 2017, 2(9): 1978-1984.
- [86] Chen S S, Xiao X, Chen B, et al. Crystallization in one-step solution deposition of perovskite films: Upward or downward?[J]. *Science Advances*, 2021, 7(4): eabb2412.
- [87] Yuan Y B, Huang J S. Ion migration in organometal trihalide perovskite and its impact on photovoltaic efficiency and stability[J]. *Accounts of Chemical Research*, 2016, 49(2): 286-293.
- [88] Shao Y C, Fang Y J, Li T, et al. Grain boundary dominated ion migration in polycrystalline organic-inorganic halide perovskite films[J]. *Energy & Environmental Science*, 2016, 9(5): 1752-1759.
- [89] Khenkin M V, Katz E A, Abate A, et al. Consensus statement for stability assessment and reporting for perovskite photovoltaics based on ISOS procedures[J]. *Nature Energy*, 2020, 5(1): 35-49.
- [90] Li B W, Deng J, Jayawardena K D G I, et al. Unraveling the degradation pathway of inverted perovskite solar cells based on ISOS-D-1 protocol[J]. *Small Methods*, 2024, 8(2): 2300223.
- [91] Li L, Wei M Y, Carnevali V, et al. Buried-interface engineering enables efficient and 1960-hour ISOS-L-2I stable inverted perovskite solar cells[J]. *Advanced Materials*, 2024, 36(13): 2303869.
- [92] Lu X Y, Sun K X, Wang Y H, et al. Dynamic reversible oxidation-reduction of iodide ions for operationally stable perovskite solar cells under ISOS-L-3 protocol[J]. *Advanced Materials*, 2024, 36(25): 2400852.
- [93] Hasan O, Arif A F M. Performance and life prediction model for photovoltaic modules: Effect of encapsulant constitutive behavior[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2014, 122: 75-87.
- [94] Li W, Bao X Z, Zhu A N, et al. Internal encapsulation enables efficient and stable perovskite solar cells[J]. *Advanced Functional Materials*, 2025, 35(4): 2414004.
- [95] Choi Y W, Jeon Y S, Lee D N, et al. Microencapsulation of grain boundaries for moisture-stable perovskite solar cells[J]. *ACS Energy Letters*, 2024, 9(8): 3754-3765.
- [96] Yang Z Z, Zhang Y L, Wu G Z, et al. Internal capsulation *via* self-cross-linking and π -effects achieves highly stable perovskite solar cells [J]. *Advanced Materials*, 2024, 36(49): 2410425.
- [97] Guo K P, Wu M, Yang S M, et al. Introduction of fluorine into spiro [fluorene-9, 9'-xanthene]-based hole transport material to obtain sensitive-dopant-free, high efficient and stable perovskite solar cells[J]. *Solar RRL*, 2019, 3(4): 1800352.
- [98] Li B, Cai Y, Tian X, et al. Decorating hole transport material with $-\text{CF}_3$ groups for highly efficient and stable perovskite solar cells[J]. *Journal of Energy Chemistry*, 2021, 62: 523-531.
- [99] Dipta S S, Rahim M A, Uddin A. Encapsulating perovskite solar cells for long-term stability and prevention of lead toxicity[J]. *Applied Physics Reviews*, 2024, 11(2): 021301.
- [100] Shum K, Tsatskina A. Solar cells: Stabilizing tin-based perovskites[J]. *Nature Energy*, 2016, 1(12): 16188.
- [101] Yu W J, Zou Y, Wang H T, et al. Breaking the bottleneck of lead-free perovskite solar cells through dimensionality modulation[J]. *Chemical Society Reviews*, 2024, 53(4): 1769-1788.

Perovskite Solar Cell: Progress, Challenges and Future Prospects

ZHAO Shikai, GUO Kunpeng*

Ministry of Education Key Laboratory of Interface Science and Engineering in Advanced Materials, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China

Highlights

Summarizes recent advancements in perovskite solar cells (PSCs).

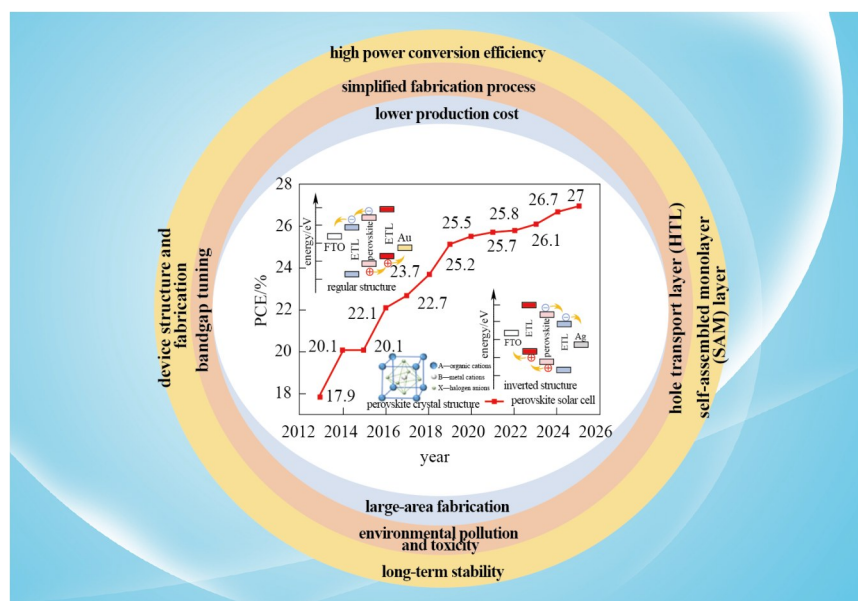
Summarizes mainstream PSC device structures, including formal, inverted, and tandem structures.

Reviews research on HTMs and HTL optimization in PSCs.

Reviews SAM applications and optimization in PSCs.

Summarizes large-area fabrication, stability, and environmental pollution issues in PSCs, plus research progress.

Graphical Abstract



Abstract: This paper delves into the latest progress, challenges, and future directions of perovskite solar cells. It starts with an introduction to the background knowledge of solar cells, emphasizing the significance of solar energy and outlining the development and main types of solar cells. Then, it thoroughly discusses the research advancements in perovskite solar cells, noting that their rapidly increasing photoelectric conversion efficiency, simplified manufacturing process, and low production cost have made them a research hotspot in the photovoltaic field. Currently, the laboratory efficiency of perovskite solar cells has exceeded 26%, but their performance and stability are still constrained by factors such as material structure, device interface quality, and packaging technology.

In terms of materials, the paper provides a detailed introduction to traditional solar cell materials and perovskite materials, highlighting the low cost, low energy consumption, and excellent photoelectric properties of perovskite materials. It points out that the general chemical formula of perovskite materials is ABX_3 , where A usually represents organic cations, B represents metal cations, and X represents halide anions. By adjusting the proportion of A, B, and X ions, the photoelectric properties of perovskite materials can be significantly changed, thereby providing various ways to optimize the efficiency of perovskite solar cells.

Regarding device fabrication and optimization, the paper explains the working principle of perovskite solar cells and introduces various fabrication techniques such as spin coating and vacuum-assisted deposition, as well as the role of interface engineering in enhancing battery performance. It also discusses the optimization of device structures, including planar formal structures, planar heterojunction structures, and HTL-free structures. Through interface engineering and structural optimization, the open-circuit voltage and fill factor of the battery can be effectively improved, thereby enhancing the photoelectric conversion efficiency.

The paper also focuses on the challenges faced by perovskite solar cells in large-area fabrication, long-term stability, and environmental toxicity. Despite significant laboratory efficiency, maintaining high efficiency during large-area fabrication remains an obstacle. Additionally, the stability of perovskite solar cells needs to be improved due to their sensitivity to environmental

factors, and the toxicity issue of lead-based perovskites is urgent. It emphasizes that while encapsulation technology can reduce the risk of lead leakage, only in-depth research on lead-free materials can fundamentally eliminate toxicity hazards.

Finally, the paper outlines the future development trends of perovskite solar cells. It is expected that with the deepening of materials science and interface optimization research, fabrication processes will be optimized, and conversion efficiency will continue to increase. Improvements in encapsulation technology will enhance stability and service life, while research on lead-free materials is expected to solve toxicity issues, promoting the development of perovskite solar cells towards more environmentally friendly and safer directions. The paper concludes that perovskite solar cells, as a new type of photovoltaic technology, have shown great application potential with their high photoelectric conversion efficiency and low manufacturing cost. Despite numerous challenges, continuous research and technological innovation are expected to make perovskite solar cells an important part of future sustainable energy solutions.

Keywords: solar cell; perovskite solar cell; perovskite materials; interface engineering; hole transport layer