

薄膜太阳能电池器件的研究进展

罗培 王珏 廖乃楠 章丽娜 *

湖州学院智能制造学院 浙江 湖州 313000

摘要: 在双碳目标驱动下, 薄膜太阳能电池因高效、轻薄的特性成为光伏领域的研究热点, 本文旨在为薄膜光伏电池的产业化应用提供理论指导与技术路径, 系统综述了钙钛矿电池的界面工程与缺陷钝化策略, 包括罗丹宁分子埋底修饰、引入梯度带隙等核心技术; 深入分析了铜基、镉基多元化合物电池的体相-界面协同优化机制; 并探讨了硫化锑等新型材料及导电聚合物电极的创新突破。研究表明, 精准调控界面能级匹配与缺陷密度是提升效率与稳定性的关键。

关键词: 薄膜太阳能电池; 界面工程; 缺陷钝化

Research Progress of Thin-Film Solar Cell Devices

Pei Luo, Jue Wang, Nainan Liao, Lina Zhang*

School of Intelligent Manufacturing, Huzhou College, Huzhou, Zhejiang, 313000

Abstract: Driven by the dual carbon goals, thin-film solar cells have become a research hotspot in the photovoltaic field due to their high efficiency and light weight. This paper aims to provide theoretical guidance and technical paths for the industrial application of thin-film photovoltaic cells. It systematically reviews the interface engineering and defect passivation strategies of perovskite cells, including core technologies such as rhodanine molecule bottom modification and introduction of gradient bandgap; deeply analyzes the bulk-interface cooperative optimization mechanism of copper-based and cadmium-based multi-junction cells; and explores the innovative breakthroughs of new materials such as antimony sulfide and conductive polymer electrodes. The research shows that precise control of interface energy level matching and defect density is the key to improving efficiency and stability.

Keywords: Thin film solar cell; Interface engineering; Defect passivation

引言

在全球能源结构加速向清洁低碳转型的大背景下, “双碳”目标的提出为光伏技术的创新发展注入了强劲动力。作为新一代光伏技术的核心分支, 薄膜太阳能电池凭借其材料消耗量少、制造成本可控、具备柔性化特质且身形轻薄等一系列突出优势, 正成为破解能源危机与环境污染双重挑战的关键技术路径。该类电池的核心设计理念在于采用微米级厚度的半导体薄膜作为光吸收层, 通过精心构建的异质结结构高效完成光电转换过程。这一结构设计不仅大幅降低了对传统光伏材料的依赖, 更在能量损耗控制上实现了突破。在制备工艺层面, 薄膜太阳能电池能够完美兼容大面积沉积技术与卷对卷连续生产模式, 相较于传统晶硅电池冗长且高能耗的生产流程, 其在规模化制造中的节能潜力与成本优势尤为显著。

近年来, 随着可穿戴电子设备的智能化升级、物联网技术的全面普及以及建筑一体化光伏 (BIPV) 概念的深度落地, 薄膜太阳能电池的应用场景得到了前所未有的拓展。当前, 全球薄膜光伏领域的研究重心已逐步从实验室阶段的效率极限探索, 转向面向

实际应用场景的稳定性强化、耐久性提升以及产业化生产的工艺适配。

1 钙钛矿太阳能电池的界面工程与缺陷钝化深度调控机制

界面能级失配与材料缺陷引发的非辐射复合, 长期制约钙钛矿太阳能电池 (PSC) 的效率与稳定性提升, 界面工程与缺陷钝化技术是破解该瓶颈的核心手段。陈选等^[1]创新性地埋底界面引入了一种具有多功能位点的埋底界面修饰分子罗丹宁 (RHO), 重点研究了 RHO 在埋底界面的协同作用及其对 PSC 能量损失和载流子损失的影响。其核心作用机制在于 RHO 分子中含有的多种官能团, 凭借优异的电子特性与 SnO_2 表面配位不足的 Sn^{4+} 和钙钛矿下表面配位不足的 Pb^{2+} 发生键合作用, 从而显著减少 SnO_2 中氧空位和钙钛矿中碘空位缺陷的数量。同时, RHO 修饰能降低 SnO_2 表面的均方根粗糙度, 改善界面物理接触, 有利于钙钛矿薄膜的均匀成核和结晶, 使钙钛矿薄膜表面 PbI_2 和晶界数量显著减少, 晶粒明显增大, 形成更为规整致密的晶体结构, 这一双重作用还能优化界面能级排列, 使 SnO_2 的导带值上移至更接近钙钛矿的导带值, 显著优化了埋底界面的能级匹配程度。

在面向钙钛矿/硅叠层光伏应用的宽带隙半透明钙钛矿太阳能电池核心研究方向上,张星团队围绕界面修饰与欧姆接触两大关键技术开展系统性协同优化,显著提升了器件效率、透光性与稳定性^[2]。研究针对溴碘混合宽带隙钙钛矿存在的卤化物相偏析、埋底界面缺陷富集以及透明电极溅射损伤等瓶颈问题,提出异质界面锚定策略,利用甲氧基取代苯乙基铵配体($x\text{-MeO-PEA}^+$)实现钙钛矿/空穴传输层界面缺陷高效钝化与Br-I分布均匀化,同时构建欧姆接触型缓冲层(OCBL)降低IZO透明电极溅射带来的器件损伤。团队通过薄膜干涉原理精准调控IZO厚度,在不牺牲光吸收与载流子抽取效率的前提下,实现半透明器件光透过率与光电转换效率(PCE)的最优平衡,所制备的半透明电池正面照射PCE达18.5%,IZO侧照射PCE达15.4%,并呈现出多彩化外观,兼顾光伏性能与建筑美学需求。该研究为高效、稳定、可规模化的两端钙钛矿/硅叠层太阳能电池开发提供了可复制的技术路径与理论支撑。

胡鑫团队则从钙钛矿薄膜本征改性角度出发,开发出一类兼具晶格应变调控与缺陷化学钝化功能的多功能有机分子钝化剂^[3]。该分子可在钙钛矿晶界与表面形成动态可逆氢键网络,一方面持续释放晶体生长与热循环过程中累积的晶格内应力,抑制薄膜开裂、孔洞与翘曲等结构退化;另一方面通过强配位作用锚定铅离子、卤离子等迁移性缺陷,阻断离子迁移引发的界面老化、相分离与电极腐蚀。经该分子钝化后,钙钛矿电池在85℃、85%RH双85严苛环境下的稳定性大幅提升,T80寿命突破1200小时,同时实现了开路电压与填充因子的同步提升,为解决钙钛矿光伏长期稳定性难题提供了高效分子设计方案。

Zhu等^[4]针对退火工艺对热蒸发法制备反式钙钛矿薄膜结晶演化路径的作用机制开展了系统研究与深入解析。研究表明,采用传统恒温退火策略时,薄膜中易残留二维相杂质,此类杂质会成为电荷复合中心,同时破坏薄膜结构的连续性,进而影响器件性能;而梯度升温退火方式可显著抑制二维相的生成与残留,有效提高三维钙钛矿相纯度与结晶完整性,为钙钛矿薄膜的大面积、高质量可控制备提供了关键工艺窗口与技术支撑。上述工作从分子设计、界面化学调控到制备工艺优化等多个维度,系统构建了完备的钙钛矿电池缺陷管理理论体系,为高效稳定钙钛矿器件的开发与产业化应用提供了全面可靠的技术指导。

2 多元化合物薄膜电池的体相-界面协同优化策略

铜基与镉基多元化合物薄膜电池普遍存在空位、反位等本征缺陷,直接影响载流子的生成、传输与收集效率,现有主流解决方案为体相组分调控与界面能带工程协同策略。

蔡彦博^[5]在碲化镉(CdTe)薄膜电池研究中,创新采用Mg掺杂SnO₂(MTO)薄膜替代传统CdS窗口层,大幅减少了短波长光的吸收损失。同时通过精准调控MgO靶材的溅射功率实现

了MTO薄膜中Mg掺杂浓度的精确控制。该MTO薄膜有效钝化了SnO₂/CdTe异质结界面的深能级缺陷,使界面缺陷浓度降低超50%;同时优化了界面能带排列,增强了内建电势,显著抑制了界面载流子的非辐射复合,提升了电子传输效率与光透过率。采用MTO/CdTe结构的电池,其开路电压从0.661V提升至0.832V,而采用MTO/CdSeTe/CdTe双吸收层结构的电池最高光电转换效率达17.2%,在碲化镉电池领域处于先进水平。

杨陈军^[6]针对铜锌锡硫硒(CZTSSe)薄膜太阳能电池中体相缺陷与界面缺陷共存导致的载流子复合严重、开路电压亏损大、光电转换效率受限的核心问题,提出了硒化过程中锡蒸汽补偿结合硫化氢原位钝化的协同调控策略。在高温硒化阶段通入锡蒸汽,有效补偿CZTSSe吸收层在高温下的锡元素挥发损失,稳定吸收层化学计量比,抑制因锡缺失引发的二次相、阳离子反位等体相深能级缺陷;同时结合硫化氢(H₂S)原位钝化技术,精准钝化CZTSSe薄膜表面、晶界及异质结界面处的悬挂键与缺陷态,显著降低载流子非辐射复合概率。该策略将CZTSSe电池的开路电压亏损降至0.28V,逼近肖克利-奎伊瑟(Shockley-Queisser)理论极限,大幅提升了器件的光电转换效率上限与性能稳定性。

赵永刚等^[7]围绕CZTSSe太阳能电池前驱液稳定性这一关键技术难题,创新性构建了二甲基亚砷-乙二醇甲醚双溶剂体系。该策略充分利用两种溶剂在极性与配位能力上的差异,精准调控前驱体中金属络合物的分解动力学行为,显著提升了前驱液在长期储存及规模化涂覆过程中的稳定性与均一性。基于该双溶剂体系制备的大面积CZTSSe吸收层薄膜,其关键组成元素分布均匀性优异,元素含量标准差控制在2%以内,为CZTSSe电池的大面积制备与产业化应用提供了重要技术支撑。

上述工作揭示了多元化合物电池缺陷演化与性能退化的内在关联,为高效稳定器件的制备提供了系统性解决方案。

3 新型薄膜体系、先进工艺与电极结构的创新突破

在新型材料体系探索与制备工艺革新方面,研究聚焦于低毒性化合物于可扩展制造技术的深度融合。陈世武^[8]以环境友好型硫化锑(Sb₂S₃)为核心研究对象,围绕其在光伏器件中的应用,开创性地开展了单结太阳能电池及两端叠层电池体系的系统性研究工作。在材料制备方面,他选用水热法进行Sb₂S₃薄膜的沉积制备,通过工艺优化成功得到表面平整致密、结晶性良好且无杂相的高质量薄膜;经测试,该薄膜的禁带宽度约为1.71eV,在可见光波段表现出优异的光吸收能力,吸收系数可达10⁵cm⁻¹以上。研究结果充分证实,Sb₂S₃兼具优异的环境稳定性与良好的太阳光谱匹配特性,是一种极具应用潜力的理想无铅叠层太阳能电池顶电池材料。

Lopes等^[9]针对Sb₂(S,Se)₃薄膜的两步水热沉积工艺进行了系统精炼与优化,通过精准调控硫/硒前驱体的浓度梯度分布,有

效诱导薄膜晶体沿 [001] 晶向实现择优取向生长, 显著改善了晶体的结晶质量与界面特性, 最终使薄膜的载流子迁移率提升至 $15 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ 。该研究不仅解决了传统溶液法制备 $\text{Sb}_2(\text{S}, \text{Se})_3$ 薄膜时结晶取向杂乱、载流子传输效率低的关键难题, 更为低成本、高性能 $\text{Sb}_2(\text{S}, \text{Se})_3$ 薄膜的规模化制备提供了切实可行的新思路与技术支撑。

Zhang 等 [10] 开发出一类本征导电聚合物电极, 通过分子掺杂策略对 PEDOT: PSS 进行改性, 实现了 4.8–5.3 eV 的宽范围功函数可调, 同时将方块电阻大幅降至 $8 \text{ } \Omega/\text{sq}$, 并成功替代传统 ITO 电极应用于器件中, 为柔性可穿戴光伏器件提供了优异的抗弯折解决方案。这些研究从材料体系、制备工艺到器件结构等多个层面不断拓展薄膜电池的技术边界, 有效加速了其产业化实用化进程。

这些研究工作从新型材料研发、先进工艺革新到器件结构优化等多个层面, 全面拓展了薄膜太阳能电池的技术边界, 有效解决了传统技术在环保性、成本、柔性化、规模化等方面的痛点问题, 加速了薄膜电池从实验室走向实际应用的实用化进程。

结论:

当前薄膜太阳能电池研究以钙钛矿体系为核心突破点, 界面工程与缺陷钝化策略显著推动了器件性能的提升。通过罗丹宁分子埋底修饰、异质界面锚定策略及多功能有机分子钝化剂的应用, 有效抑制了非辐射复合, 增强了电荷提取, 并优化了能级匹配。其中, 采用多功能有机分子钝化剂的钙钛矿电池在 85°C /85% RH 双 85 严苛环境下 T80 寿命突破 1200 小时, 半透明电池实现了正面照射 18.5% 的光电转换效率。退火工艺优化 (如梯度升温退火) 进一步抑制了二维相杂质, 提高了三维钙钛矿相的纯度与结晶完整性。上述工作从分子设计、界面化学调控到制备工艺优化, 系统构建了钙钛矿电池缺陷管理的理论体系。

多元化合物薄膜电池通过体相 – 界面协同优化实现了效率跃升。例如, 采用 MTO 窗口层及双吸收层结构的 CdTe 电池最高效率达 17.2%; 锡蒸汽补偿与硫化氢原位钝化协同策略将 CZTSSe 电池的开路电压亏损降至 0.28 V; 双溶剂体系有效提升了前驱液稳定性, 使大面积吸收层元素分布标准差控制在 2% 以内。在新型材料体系方面, 低毒性的硫化锑 (Sb_2S_3) 薄膜具有 1.71 eV 的禁带宽度和 10^5 cm^{-1} 以上的吸收系数, 展现了作为叠层电池顶电池的潜力; 通过梯度浓度调控实现 [001] 择优取向生长的 $\text{Sb}_2(\text{S}, \text{Se})_3$ 薄膜,

其载流子迁移率提升至 $15 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ 。此外, 本征导电聚合物电极的开发 (方块电阻低至 $8 \text{ } \Omega/\text{sq}$, 功函数可调 4.8–5.3 eV) 为柔性可穿戴光伏器件提供了优异的抗弯折解决方案。

综上, 从钙钛矿的界面缺陷管理、多元化合物的体相 – 界面协同优化, 到新型低毒性材料与柔性电极的创新突破, 薄膜太阳能电池在高效率、高稳定性、低成本和柔性化方向上均取得了实质性进展, 为建筑一体化光伏 (BIPV) 和可穿戴能源应用提供了关键技术支撑。

参考文献:

- [1] 陈选, 王升灿, 王明, 等. 基于罗丹宁埋底界面修饰的钙钛矿太阳能电池性能研究 [J/OL]. 现代化工, 1–16, 2026. <https://link.cnki.net/urlid/11.2172.TQ.20251224.1553.012>.
- [2] 张星. 基于界面修饰与欧姆接触的宽带隙半透明钙钛矿太阳能电池的研究 [D]. 青岛大学, 2024.
- [3] 胡鑫. 多功能分子用于钙钛矿薄膜应变调控与缺陷钝化研究 [D]. 西南石油大学, 2024.
- [4] Zhu Y, Xiong W, Liu H, et al. Effects of annealing on film and device performance of thermally evaporated inverted perovskite solar cells[J]. Solar Energy, 2026, 304: 114214.
- [5] 蔡彦博. 碲化镉薄膜太阳能电池界面与能带调控研究 [D]. 中国科学技术大学, 2025. DOI:10.27517/d.cnki.gzjku.2025.000787.
- [6] 杨陈军. 体相 – 界面缺陷双调控制备高效铜锌锡硫硒薄膜太阳能电池 [D]. 内蒙古大学, 2025.
- [7] 赵永刚. 基于二甲基亚砷和乙二醇甲醚双溶剂制备铜锌锡硫硒薄膜太阳能电池研究 [D]. 云南师范大学, 2024.
- [8] 陈世武. 基于硫化锑单结与两端叠层薄膜太阳能电池研究 [D]. 华中科技大学, 2024.
- [9] Lopes V, Monteiro A, Mesquita G, et al. Refining 2-step hydrothermal deposition of $\text{Sb}_2(\text{S}, \text{Se})_3$ films for solar cell and photoelectrochemical device applications[J]. Journal of Materials Science, 2025, 60(30): 12906–12923.
- [10] Zhang Y, Gilani S E H, Rasheed M H, et al. Intrinsically conductive polymer electrodes for thin-film solar cells and energy storage devices[J]. Journal of Power Sources, 2025, 652: 237641.

基金信息: 大学生科技创新项目 (2026R454A004)