引用格式：陈睿豪，张钧硕，戴小康，等. 绿色溶剂在钙钛矿太阳能电池中的研究进展与应用[J]. 中国材料进展，2026，45(10)：994-1002.

CHEN R H, ZHANG J S, DAI X K, *et al*. Research Progress and Application Status of Perovskite Solar Cell Green Solvents[J]. Materials China, 2026, 45(10): 994-1002.

特约专栏

绿色溶剂在钙钛矿太阳能电池中的研究进展与应用

陈睿豪，张钧硕，戴小康，刘宇轩，叶拉尔斯·叶尔米克，李晔芝

（西北工业大学材料学院，陕西 西安 710012）

摘 要：作为一种重要的新能源材料，高效的钙钛矿太阳能电池的生产制备工艺离不开溶剂的使用，但其主流制备工艺所用溶剂，诸如 N,N-二甲基甲酰胺、氯苯等，都具有严重的环境或生物毒性，阻碍了钙钛矿的绿色制备，成为其商业化应用的一大障碍。鉴于此，寻找合适的绿色溶剂得到重视，以期降低环境足迹和职业健康风险，达到绿色环保生产的目的。首先将现有钙钛矿绿色溶剂体系按功能不同分为绿色前驱体溶剂、绿色反溶剂、辅助添加剂和混合溶剂体系 4 类，并在分类的基础上总结各类溶剂的特性和亮点，评估各种溶剂在钙钛矿太阳能电池制备中的作用和功效。然后，阐述了绿色溶剂在钙钛矿薄膜制备中的具体应用策略。最后，讨论了钙钛矿绿色溶剂现存的关键问题，并对其未来创新解决方案进行了展望。旨在为钙钛矿太阳能电池的绿色制备提供溶剂选择方面的参考，并为绿色溶剂的后续开发提供思路，助力钙钛矿太阳能电池的大规模绿色制备。

关键词：新能源材料；钙钛矿太阳能电池；绿色溶剂；制备方法；溶剂毒性

中图分类号：TM914.4 **文献标识码**：A **文章编号**：1674-3962(2026)10-0994-09

Research Progress and Application Status of Perovskite Solar Cell Green Solvents

CHEN Ruihao, ZHANG Junshuo, DAI Xiaokang, LIU Yuxuan, YELAERSI Yeermike, LI Yezhi

(School of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710012, China)

Abstract: The fabrication of high-performance perovskite solar cells (PSCs), inherently relies on solvent-based processing. However, conventional methods predominantly employ hazardous solvents, including N,N-dimethylformamide and chlorobenzene, which has severe ecological and biological toxicity, therefore undermines sustainable manufacturing pathways, and represents a critical bottleneck for PSCs industrial-scale deployment. To address this challenge, the search for suitable green solvents has gained attention in order to reduce environmental impact and occupational health risks, thereby achieving environmentally friendly production. This review systematically organizes currently explored green solvents for perovskite processing into four distinct groups based on their functions: green precursor solvents, green anti-solvents, auxiliary additives and mixed solvent systems. Building on this classification, the characteristics and key merits of each category are systematically summarized, and their functions and performance in PSCs fabrication are evaluated. Then, this review further outlines practical implementation approaches, such as solvent engineering, sequential deposition, and additive-assisted crystallization. In the end, this review critically examines recent key challenges of perovskite green solvents, including limited solubility of precursors, poor film uniformity, scalability constraints, and long-term stability concerns, and proposes forward-looking directions. This review aims to offer references to solvent selection for green fabrication of PSCs and provide ideas for green solvents' future development to support large-scale green fabrication of PSCs.

Key words: new energy materials; perovskite solar cells; green solvents; preparation methods; solvent toxicity

收稿日期：2026-05-14 **修回日期**：2026-08-07

基金项目：国家自然科学基金项目(22375163)

第一作者：陈睿豪，男，1991 年生，教授，博士生导师，Email：rhchen@nwpu.edu.cn

DOI：10.7502/j.issn.1674-3962.202605014

1 前 言

钙钛矿材料，特别是有机-无机杂化钙钛矿，由于优

异的光电性质，近 10 年来在光伏及光电领域均带来了革命性的进步，其光电转换率更是从 3.8%[1] 提高到 27.3%[2]。然而，钙钛矿材料仍存在环境不稳定性(对湿度、温度、光照都敏感)[3]、铅毒性[4]、制备过程高能耗及潜在环境污染[5]的问题，故其大规模商业化应用仍面临重大挑战。合理设计溶剂体系对钙钛矿薄膜的结晶质量、器件性能及生产成本都具有决定性意义。

传统的钙钛矿制备方案非常依赖高沸点和高极性的毒性有机溶剂，比如 N,N-二甲基甲酰胺(DMF)、氯苯(CB)、甲苯等[6]。虽然这些溶剂在调节钙钛矿结晶动力学和溶解金属卤化物方面具有很大优势，但它们对生产人员和环境的危害日益突出。我国生态环境部于 2022 年 12 月发布、2023 年 3 月实施的《重点管控新污染物清单(2023 年版)》将 DMF 列为重点管控的有毒污染物[7]；1996 年发布的《大气污染物综合排放标准》对甲苯、CB 等实施严格排放管控[8]。

2016 年发布的溶剂综合评价指南(Chem21 标准)作为绿色化学领域广泛使用的溶剂危害属性筛选工具之一，也适用于钙钛矿绿色溶剂的选择和开发。基于 Chem21 标准的安全(safety，S)、健康(health，H)、环境(environment，E)3 个维度(每个维度按照 1~10 分)，为部分钙钛矿常用溶剂打分(评分越高，危害越大)，并综合 3 个评分结果给出该溶剂的推荐(recommended)、有问题(problematic)、和高危(hazardous)三级环保程度[9, 10]。鉴于此，本文所讨论的“绿色溶剂”的筛选与界定主要参考 Chem21 溶剂选择指南，重点关注在 S、H、E 这 3 个维度上评级为推荐或有问题，且毒性显著低于传统溶剂的类别(表 1)。需要说明的是，Chem21 标准仅基于以上 3 类危害指标对溶剂本身进行定性分级，侧重职业健康和环境风险评价，未涵盖钙钛矿光伏工艺适配性和成膜性能等维度，本文仅将它作为溶剂环境属性的参考评价体系。

表 1　钙钛矿常用溶剂的 Chem21 标准打分及分类

Table 1　Chem21 standard scoring and classification of common solvents for perovskite

Solvent	Safety	Health	Environment	Classification
DMF	3	9	5	Hazardous
DMSO	1	1	5	Problematic
CB	3	2	7	Problematic
Toluene	5	6	3	Problematic
Water	1	1	1	Recommended
Ethanol	4	3	3	Recommended
IPA	4	3	3	Recommended
ACN	5	3	5	Problematic
EA	5	3	3	Recommended

钙钛矿技术的大规模商业化不仅高度契合“双碳”目标与绿色化学理念，其采用的绿色溶剂更兼具低毒性、低挥发性有机化合物(volatile organic compounds，VOCs)排放及可持续特性，从而显著提升生产安全性并有效降低制造成本。据此，开发优秀的钙钛矿绿色溶剂，以及建立钙钛矿绿色溶剂体系得到了学界的日渐重视。希望本文为钙钛矿太阳能电池的绿色制备提供溶剂选择上的参考，并为绿色溶剂的后续开发提供思路，助力钙钛矿太阳能电池的大规模绿色制备。

2　钙钛矿绿色溶剂的分类与特性

2.1　绿色前驱体溶剂

前驱体溶剂核心功能为溶解钙钛矿前驱体盐，决定前驱体溶液的基础溶解性与挥发速率，是钙钛矿薄膜制备的基础。根据其来源可细分为非生物基和生物基绿色前驱体溶剂。

水是公认的最理想环保的绿色前驱体溶剂。然而，钙钛矿薄膜极强的水解性[11]，以及水极大的表面张力(72.8 mN/m，DMF 的为 25.7 mN/m)对钙钛矿薄膜连续性的破坏[12, 13]，都严重制约了水作为溶剂的应用。鉴于此，Zhang 等[14]提出了一种利用油酸钾(PO)降低水表面张力的策略，有效解决了水高表面张力下钙钛矿孤岛状结晶的问题，并在 0.09 cm^2 的小面积器件上取得了 24.14%的光电转换效率。他们[15]还提出了使用 $PbCO_3$ 水溶液中的 CO_3^{2-} 抑制钙钛矿薄膜表面的缺陷形成，使器件达到了 23.95%的稳态输出效率。

乙醇也是一种常用、廉价的绿色溶剂，且具备易挥发的优势。但是，PbI_2 不溶于乙醇的特性严重阻碍了乙醇作为绿色前驱体溶剂的应用，需要通过与其他高溶解度溶剂混合或使用添加剂来提高溶解度。Rezaee 等[16]通过将有毒溶剂乙腈(ACN)替换为占墨水总溶剂体积 30%，50%，70%或 90%的乙醇并进行筛选，既保留了前驱体中用于溶解 PbI_2 的溶剂，又利用乙醇提高了溶剂环保性，最佳效率达 19.56%。

一些其他的非生物基溶剂，比如异丙醇(IPA)、乙酸乙酯(EA)、三乙基磷酸酯(TEP)[17-19]的应用也得到关注，且都取得了较高的光电转换效率。

γ-戊内酯(GVL)是一种公认的低毒性、高生物降解性[20]以及高极性(介电常数≈33)的优良生物基[21]绿色溶剂，在许多领域[22-24]得到应用。Miao 等[25]使用 GVL 溶剂，借助 GVL 与甲脒阳离子(FA^+)间的强相互作用稳定前驱体溶液，使 $FAPbI_3$ 墨水在 1 年时间内仍保持稳定(图 1)。其器件实现了 25.09%的光电转换效率。然而，GVL 体系对 FA 体系的钙钛矿，尤其是对 FAI 和 PbI_2 的溶解度较低[26]，需要合适的添加剂来提高其溶解度。

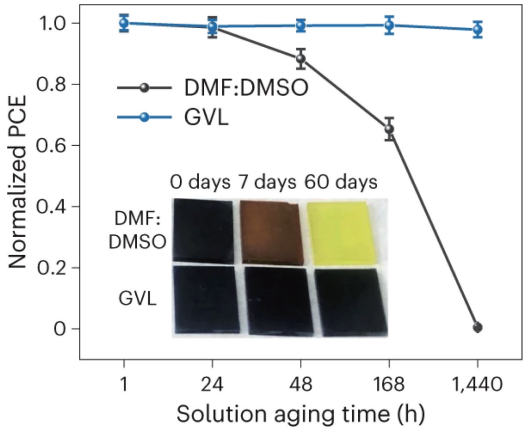


图 1 DMF∶DMSO 和 GVL 基钙钛矿太阳能电池在不同老化时间下的归一化光电转换效率变化[25]

Fig. 1 Normalized power conversion efficiency (PCE) of DMF∶DMSO- and GVL-based perovskite solar cells with different solution aging time[25]

而另一种生物基溶剂 γ-丁内酯(GBL)尽管一度已作为低毒性的钙钛矿绿色前驱体溶剂[27-29]，然而严重的致幻作用导致它被多个国家立法禁止，如今几乎完全被 GVL 取代。还有一部分其他生物基前驱体溶剂，如乳酸乙酯[30]和甘油缩甲醛(Gly-F)[31]，有用于钙钛矿绿色溶剂的案例。

2.2 绿色反溶剂

反溶剂，核心功能为旋涂或刮涂工艺中诱导前驱体快速过饱和结晶，调控薄膜晶形和性能，是钙钛矿薄膜形成的关键。当前钙钛矿主流反溶剂 CB 因具有剧毒、致癌、高含量低挥发性有机化合物等劣势，使得寻找合适的绿色反溶剂尤为重要。

EA 的低毒性、易降解等特性，使它成为最成熟的钙钛矿绿色反溶剂，其最早应用可追溯到 2020 年 Zhang 等[32]的成果，并被部分其他研究[33]所采纳。然而，EA 的极性太高，导致钙钛矿成核速率过快，晶粒过小，需要使用无机盐(KSCN[34]、CsBr[35])以及有机物(丙酸(PA)[36])等添加剂或混合反溶剂来使 EA 发挥最大功效。Yang 等[37]开发了一种 EA 和 IPA 物质的量比为 5∶1 的混合溶剂，用 IPA 提高结晶质量，对应器件光电转换效率可达到 22.9%。Liu 等[38]向 EA 中添加不同比例的正己烷混合制备反溶剂，以调节反溶剂萃取速率；当正己烷物质的量分数为 60%时钙钛矿薄膜平均晶粒尺寸为 249 nm，比纯 EA 制备薄膜时提高 17%。

除了 EA，还有一些绿色反溶剂具有良好的效果。乙酸丁酯(BAc)也是一种优良的绿色反溶剂，前文 Miao 等[25]的研究中就使用了 BAc 作反溶剂，Kim 等[39]将 BAc 作为反溶剂的研究也取得了 23.33%的效率，具有一定潜力。虽然乙醇对 PbI_2 的溶解度不佳，但是其低溶解度也可以反过来作为反溶剂应用。Xu 等[40]通过调配 MABr 的乙醇反溶剂来提高钙钛矿成膜质量，取得了 21.53%的效率。尽管 IPA 常被用作溶剂或反溶剂来提高溶解度或萃取组分的性能[20, 37, 41]，但相较于其他醇类，它本身也是一种优良的绿色反溶剂[42]。Li 等[43]揭示了 IPA 与 DMF/DMSO 之间的氢键作用，相应的器件取得了 24.8%的最佳效率。2025 年，Sun 等[44]还报道了使用绿色反溶剂碳酸二甲酯(DMC)制备的器件，实现了 25.18%的光电转换效率，这是目前绿色反溶剂相关研究中光电转换效率的最高值之一。

2.3 辅助添加剂

辅助添加剂，核心功能为调控钙钛矿薄膜的结晶动力学、钝化缺陷、调控前驱体溶剂或反溶剂溶解度等。它在溶剂中的含量很小，不承担主溶剂的溶解功能，但在弥补绿色溶剂性能不足、提高钙钛矿薄膜质量方面承担着重要作用。可按照作用功能不同划分辅助添加剂的种类，包括结晶调控型添加剂、前驱体溶解度提高型添加剂和其他添加剂 3 类。

结晶调控型添加剂。钙钛矿的晶形，包括钙钛矿晶体的连续性、覆盖度和粗糙度，对钙钛矿器件的性能至关重要[45]，结晶调控型添加剂应运而生。例如，Zhang 等[14]使用绿色添加剂 PO 降低水的表面张力，从而解决了水的高表面张力带来的钙钛矿孤岛状结晶问题。Mohammed 等[34]使用无机盐 KSCN 延缓绿色反溶剂 EA 中钙钛矿薄膜形成，以确保钙钛矿形成更大的薄膜并减少缺陷，相应器件取得了 17.12%的最佳效率。Chao 等[46]使用甲基铵醋酸盐(MAAc)离子液体控制 α 相 $FAPbI_3$ 薄膜形成，揭示了 MAAc 调控结晶的机理，并且相应器件取得了 23.91%的最佳效率。

前驱体溶解度提高型添加剂。虽然钙钛矿绿色前驱体溶剂的研究已有许多进展，但是相较于 DMF，绿色前驱体溶剂对诸如 FA、PbI_2 等钙钛矿组分的溶解度仍然不足，需要前驱体溶解度提高型添加剂辅助提高前驱体对钙钛矿组分的溶解度。Yun 等[47]向乙醇中掺入二甲乙酰乙胺(DMAC)和氯化烷基铵(RNH_3Cl)2 种路易斯碱，以提高 PbI_2 在乙醇中的溶解度，在 SnO_2 电极上取得了 25.1%的光电转换效率。针对 GVL 前驱体溶液溶解度较低的问题，Kim 等[26]通过向 GVL 系溶剂中添加 MACl，提高了溶剂活性和溶解能力。他们还发现，MACl 浓度越高，对钙钛矿薄膜结晶越有利，器件效率越高，最高可取得 20.6%的效率。

其他添加剂。除了调控结晶、提高前驱体溶解度等主要功能，辅助添加剂还有诸如提高空穴传输效率、钝

化钙钛矿表面、调整能级一致等其他功能。Jeong 等[48]开发了一种用于空穴传输层材料 2,2′,7,7′-四[N,N-二(4-甲氧基苯基)氨基]-9,9′-螺二芴(Spiro-OMeTAD)中的新型多功能离子液体添加剂 1-(2-甲氧基乙基)-1-甲基吡咯烷鎓双(三氟甲磺酰基)酰胺(MMPyTFSI)。该添加剂具备多重功能：可替代吸湿性强、稳定性差的掺杂剂 LiTFSI，避免有毒溶剂 4-tBP 的使用，同时提高空穴传输效率并钝化钙钛矿表面。在绿色反溶剂四氢呋喃(THF)替代 CB 作反溶剂时，它们的钙钛矿器件仍能保持优异的性能，光电转换效率可提升到 23.10%。

2.4　混合溶剂体系

混合溶剂体系通过 2 种及以上前驱体溶液的复配，协同优化钙钛矿前驱体溶解能力、挥发速率和成膜质量，是一种前驱体溶液的组合应用形式。混合溶剂体系有促使钙钛矿前驱体制备彻底弃用有毒溶剂的巨大潜力，使它在钙钛矿绿色溶剂工程中脱颖而出。谭海仁团队[5]开发了一套 DMSO/ACN/乙醇混合溶剂体系以摒除 DMF，其中以 DMSO 和 ACN 溶解铯盐和溴盐，以乙醇防止前驱体降解，制备的宽带隙(1.65~1.80 eV)全钙钛矿串联太阳能电池模块取得了 23.8%的效率(图 2)。之后，该团队[6]又开发了一套 GVL/2-甲基四氢呋喃(2-MeTHF)/DMSO 体系，以常用的 GVL 和 DMSO 作溶剂基底，通过 2-MeTHF 调整溶剂配位和蒸发速率，制备的器件取得了 17.2%的全面积稳态效率。同样，开发完全基于环境污染轻微或低毒性的组分的混合溶剂体系受到重视。Wang 等[49]近期通过控制高极性 2-甲氧基乙醇(2-Me)和低极性 ACN 比例以精确控制钙钛矿结晶，并引入离子液体 MAAc 促进薄膜与底层基板粘附。该体系工艺窗口宽且毒性较低，制备的器件取得了 21.94%的效率。

基于以上研究成果，表 2 比较了在不同器件结构、器件有效面积、制备方法等条件下，使用不同前驱体溶剂、反溶剂及辅助添加剂所制备的钙钛矿器件的最佳效率。

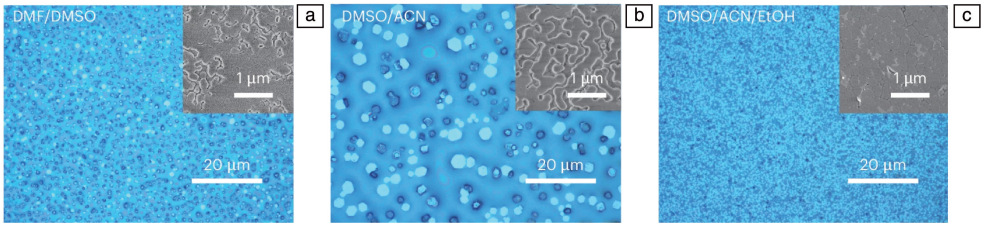


图 2　DMF/DMSO(a)、DMSO/ACN(b)、DMSO/ACN/EtOH(c)3 种溶剂制备的钙钛矿薄膜的显微照片和从氧化铟锡玻璃基底上剥离的宽禁带钙钛矿薄膜的表面扫描电子显微镜照片[5]

Fig. 2　Microscopic images of the DMF/DMSO (a), DMSO/ACN (b) and DMSO/ACN/EtOH (c) solvents prepared perovskite films and top-view scanning electron microscope images of wide-bandgap perovskite films peeled off from indium tin oxide glass substrate[5]

表 2　基于钙钛矿绿色溶剂制备的器件统计表

Table 2　Statistical table of perovskite solar cells fabriated based on perovskite green solvents

Device structure	Active area/cm^2	Precursor solvent	Anti-solvent	Additive	Fabrication method	Champion power conversion efficiency/%	Ref.
FTO/TiO_2/$MAPbI_3$/PCBM/Ag	0.09	H_2O	Toluene	PO	Spin-coating	24.14	[14]
FTO/TiO_2/$FAPbI_3$/Spiro-OMeTAD/Au	0.094	EtOH	—	DMAC/RNH_3Cl	Spin-coating	25.1	[47]
ITO/Cu:NiO_x/$MAPbI_3$/$PC_{60}BM$/BCP/Ag	0.25	EtOH/ACN	CB	DMSO	Bar-coating	19.56	[16]
FTO/TiO_2/SnO_2/$MAPbI_3$/Spiro-OMeTAD/Ag	0.21	GVL	BAc	—	Spin-coating	25.09	[25]
FTO/NiO_x/PTAA/$(FA_{1-y}MA_y)$-$Pb(I_{1-x-z}Br_xCl_z)_3$/PTAA/Ag	0.09	DMF/DMSO	EA/IPA	—	Spin-coating	22.9	[37]
PEN/ITO/SnO_2/$(MAPbI_3)_{0.95}$-$(FAPbIBr_2)_{0.05}$/Spiro-OMeTAD/Au	0.12	DMSO/DMF	BAc	—	Spin-coating	23.33	[39]
FTO/TiO_2/$MAPbI_3$/CuPc/Au	0.08	DMF/DMSO	EA	KSCN	Spin-coating	17.12	[34]

续表

Device structure	Active area/cm^2	Precursor solvent	Anti-solvent	Additive	Fabrication method	Champion power conversion efficiency/%	Ref.
ITO/SnO_2/$FAPbI_3$/Spiro-OMeTAD/MoO_3/Au	0.075	DMF	—	MAAc	Spin-coating	23.91	[46]
ITO/SnO_2/$FAPbI_3$/Spiro-OMeTAD/Au	0.1	GVL/DMSO	EA	MACl	Spin-coating	20.6	[26]
ITO/NiO_x/$(FA_{1-y}MA_y)$-$(Pb_{1-x-z}I_xBr_z)_3$/C_{60}/BCP/Cu (tandem cells)	20.25	DMSO/ACN/EtOH	—	—	Blade-coating	23.8	[5]
ITO/SnO_2/$MAPbI_3$/Spiro-OMeTAD/Ag	0.064	ACN/2-Me	—	MAAc	Blade-coating	21.94	[49]

3 绿色溶剂在钙钛矿合成中的多维调控策略

3.1 绿色溶剂的设计与筛选策略

在钙钛矿材料的整个制备流程中，溶剂法是最为常用的工艺，也是最重要的一步，不仅决定着产品的成本与可量产性，更决定着产品的稳定性、能量转化率、使用寿命等关键指标。然而，传统的溶剂法存在着使用的有机溶剂不环保[50]、前驱体溶液不稳定[51]、难以大规模应用[52]等问题。近年来，业界、学界对溶剂法的合成方案、绿色溶剂的选择、绿色溶剂的稳定性等展开了大量的研究，在相关领域取得了一系列重要进展。

传统钙钛矿生产方法中，所使用的主要溶剂仍为有毒性且易危害环境的 DMF。想要提高钙钛矿太阳能电池的环保性，降低其工业生产成本，使它真正成为高效、绿色、高性价比的新一代光伏器件，就必须解决其绿色溶剂的设计与筛选问题。

Lee 等[33]对绿色溶剂的筛选方法做出了简要的概括。他们的研究指出：用于形成前驱体溶液的绿色溶剂是否适合钙钛矿生产，取决于 3 个关键指标：溶解能力、正交加工性与所得薄膜质量。

而在更加具体的分类与筛选方法方面，包括 SmithKline Beecham[53]、GlaxoSmithKline[54]、Pfizer[55]、Sanofi[56]等公司，都对溶剂进行了环境危害性方面的排序。Chem21 标准采用六点评分体系，从安全、健康、环保等方面对化学溶剂进行了分类[10]。这种分类方法对未来钙钛矿太阳能电池的溶剂选择具有参考价值。然而，上述的一系列标准都只包括了环境、健康等方面的因素，而不能兼顾实际应用中的需求，即溶剂的溶解能力、正交加工性与所得薄膜质量等指标。

对于适合钙钛矿材料所需溶剂的筛选标准，早在 2018 年，Babaei 等[57]就提出了使用 Hansen 溶解度参数预测 $PbBr_2$ 和 PbI_2 在溶剂中溶解度的方法；2020 年，Lei 等[58]则提出了新的溶解度参数 δ_{DN} 来量化溶剂与钙钛矿前驱体之间的配位相互作用，以及将 δ_{DN} 与 Hansen 参数结合的预测方法。Meng 等[59]基于前述一系列研究总结了预测溶解度的数个关键指标，即介电常数、路易斯碱性、Hansen 氢键参数、Mayer 键级等，还对低毒性经典有机溶剂、绿色反溶剂、生物基溶剂、水相溶剂等一系列绿色溶剂的对应参数进行了总结对比。

3.2 绿色溶剂介导的工艺优化策略

绿色溶剂相比于传统溶剂，在人体健康、环境友好性等方面展现出显著优势。然而，在实际生产中，一大部分绿色溶剂仍然难以运用于钙钛矿元件的工业生产。其中，最为核心的问题在于绿色溶剂与大面积涂布工艺的兼容性差，具体包括去湿润、加工窗口狭窄[60]、大面积边缘效应[6]等问题。近年来，学界通过一系列研究，部分程度解决了上述问题。

去湿润问题，指当使用高极性的绿色溶剂(如 DMSO)在疏水性空穴传输层上进行涂布时，溶液无法均匀铺展而收缩成液滴状，导致薄膜覆盖率差、出现针孔等问题。去湿润问题的现行解决方案包括：使用界面润湿剂[60,61]，即使用 SiO_2 颗粒作为润湿剂，提高表面能；用亲水亲油平衡值更低的 N-甲基-2-吡咯烷酮(NMP)替代 DMSO，改变体系的结合能[62]；使用低极性和中度挥发性的正丁醇(nBA)替代传统醇类溶剂，抑制水解的同时提高薄膜平整度[63]；使用界面工程与混合工艺，即结合物理气相沉积与刮涂，无机层用物理气相沉积，有机层用绿色溶剂刮涂[64]等。

加工窗口狭窄，指 DMSO 等绿色溶液体系的成膜效果对工艺参数的要求很严格，只有在狭窄的工艺参数区间(如温度、气流、刮涂速率等)内才能获得高质量薄膜，导致产品的失败率变高。应对这一问题的解决方案主要有 3 种：① 工艺优化，使工艺参数更加精确；② 调整溶液组分，辅助成核调控过程；③ 加入添加剂，延长加工窗口等。针对工艺优化，有气体淬灭[65]、氮气刀辅助刮涂(图 3)[66]、一步旋涂[67]、狭缝涂布[68]、前驱体稀释[69]等方法；针对调整溶液组分，有混合溶剂[6]、定制化溶剂[70]配位设计等方法；针对加入添加剂，有稀土

离子掺杂[71]、聚合物添加[72]、使用离子液体[73]等方法。以上的方法在生产中往往协同使用，从而取得最好的生产效果。

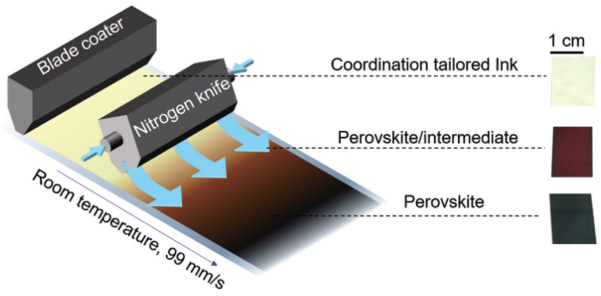


图 3　氮气刀辅助刮涂钙钛矿薄膜[66]

Fig. 3　N_2-knife-assisted blade coating of perovskite films[66]

大面积边缘效应，指溶剂在薄膜边缘的挥发速率远快于中心区域，导致边缘区域结晶质量差、缺陷密度高、薄膜均匀性下降。主要的几种解决方案包括：溶剂约束边缘保护策略[6]、原位聚合物框架策略[74]、溶剂混合策略[75]，以及最新提出的界面流体锁定策略[76]等。这些方案可以有效缓解绿色溶剂的边缘效应，提高成膜的质量。

以上的一系列方法不仅对钙钛矿材料的现行生产问题进行了有效的优化，也为钙钛矿工艺流程进一步优化提供了新的思路。钙钛矿材料生产正在从实验室的少量生产向大规模量产稳步迈进。

4　当前挑战与未来发展方向

4.1　现存关键问题与创新解决方案

钙钛矿薄膜制备是钙钛矿太阳能电池量产的核心工序，当前主流制备工艺包含狭缝涂布、热蒸镀、喷墨打印等。在绿色化学导向下，若采用低毒绿色溶剂制备钙钛矿薄膜，各类工艺均会不同程度面临前驱体溶解能力不足的难题[5]。该现象的根源在于金属卤化物钙钛矿前驱体在极性非质子绿色溶剂中的溶解度普遍极低[77]。例如，乙醇作为一种典型的绿色溶剂，具有低毒、易挥发的特性，但单纯乙醇溶剂对钙钛矿核心碘源 PbI_2 的溶解能力极差，无法直接溶解 PbI_2 配制前驱体溶液。针对这一瓶颈，Yun 等[47]提出复合溶剂调控策略：以乙醇为主溶剂，复配特定比例 DMAC 和 RNH_3Cl 2 种路易斯碱，依靠氯离子配位作用大幅提升钙钛矿前驱体在乙醇体系中的溶解度。基于该改良乙醇基前驱体溶液，研究人员最终成功制备出结晶致密、均匀性良好的 α-$FAPbI_3$ 钙钛矿薄膜。

一般来说，制备一个小尺寸(2 cm×2 cm)的实验室电池，绿色反溶剂用量需要超过 0.1 mL，随着尺寸增大，所需绿色反溶剂量会更多。如果钙钛矿光伏达到千瓦级的发电水平，大量有害物质随溶剂释放到环境中，可能引发严重的安全隐患[78, 79]。然而，此前大多数研究旨在提高绿色反溶剂的高效率和稳健性，仅适用于活性面积较小(约 0.1 cm^2)的器件；而对较大的(>1.0 cm^2)和特大的(>10.0 cm^2)高性能太阳能电池和组件则缺乏充分研究[80]。Hu 等[81]研究了绿色反溶剂的饱和蒸气压和沸点如何影响模块尺寸钙钛矿薄膜的形态和光电子特性，以及它们对大面积太阳能电池和模块光伏性能的影响。对比了 3 种不同的绿色反溶剂 EA、三氟甲苯(TFT)和苯甲醚(ANS)后发现，使用 TFT 绿色反溶剂制备的钙钛矿薄膜具有更均匀的晶粒尺寸、更长的载流子寿命以及更低的缺陷密度和更少的载流子复合。

此外，钙钛矿太阳能电池部署规模的增加，会同时带来废弃组件铅浸出与绿色溶剂排放双重环境隐患[82]。对此，研究者们提出了生命周期评估这一概念。它常被用于评估钙钛矿太阳能电池中各种残留物质，主要是铅类物质回收过程对环境的影响。当前器件组分复杂、铅污染风险突出、绿色溶剂与关键材料回收技术不足等问题，不仅阻碍钙钛矿太阳能电池商业化进程，还对环境和资源利用产生深远负面影响，需要重点关注。Xiao 等[77]创新性地使用一种低成本、基于绿色溶剂的整体回收策略，开发了一种高效的水基钙钛矿回收方法(图 4)。相比填埋处理，此策略使钙钛矿光伏相关的资源消耗减少了 96.6%，人体毒性(致癌效应)影响降低了 68.8%。Li 等[83]提出了一种可持续钙钛矿光伏的闭环制造工艺，从原料材料来源、溶液处理办法、运行过程时铅释放的应对以及组件有效回收等 4 个部分对其进行总结与创新，力求实现完全可持续的闭环钙钛矿太阳能电池技术。

4.2　创新解决方案与跨学科机遇

多学科交叉能够为绿色溶剂开发与钙钛矿工艺优化提供全新思路。多个研究团队通过计算机辅助方法进行钙钛矿绿色溶剂的筛选。例如，Cardenas 等[84]使用计算机辅助分子设计等方法筛选和设计 DMF 的替代溶剂；而李宁团队[85]则使用高通量计算方法进行绿色溶剂的筛选。作者团队[17]通过开发一种两步贝叶斯机器学习优化框架，创建了一种基于低毒前驱体溶剂 TEP 的新钙钛矿沉积方法，在 $FAPbI_3$ 器件上取得了 24.26% 的最佳光电转换效率。首先建立了一个溶解度预测模型以得到前驱体溶液成分与溶解度的关系，然后将溶解度信息作为约束函数传递到基于贝叶斯优化框架的光电转换效率预测模型中，从而能够系统地优化退火温度和溶剂组成等工艺变量，确保了诸如溶解度优化、薄膜形态评估和最终器件效率提升等连续步骤之间的协调(图 5)。机器学习与传统仿真方法的结合为可扩展、高效的光伏技术的发展奠定了坚实基础。

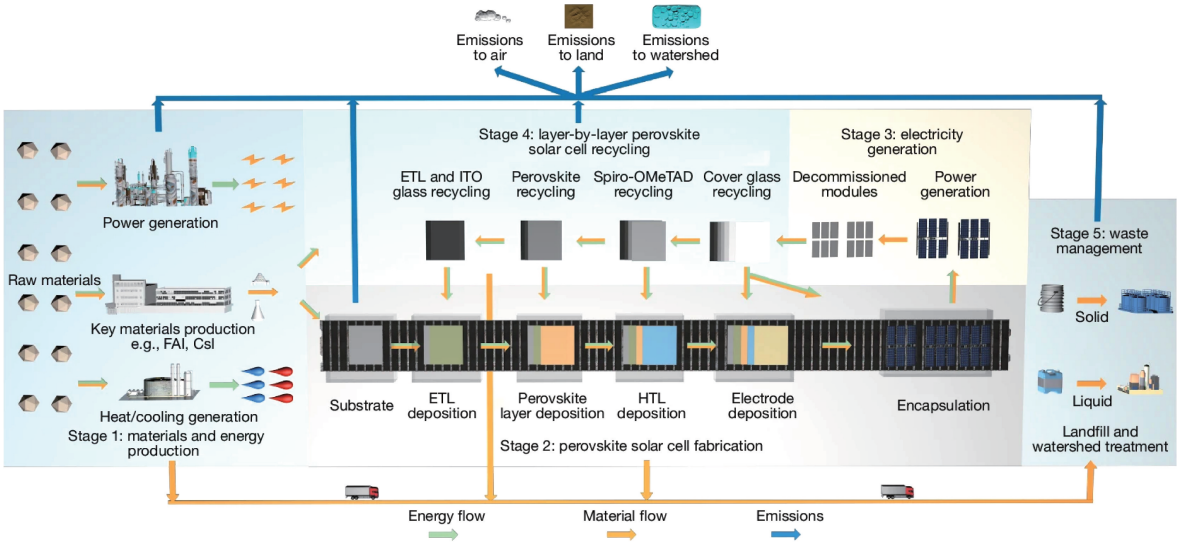


图 4 一种基于水基钙钛矿太阳能电池的生命周期评估系统框架[77]

Fig. 4 A life cycle assessment system framework based on water-based perovskite solar cells[77]

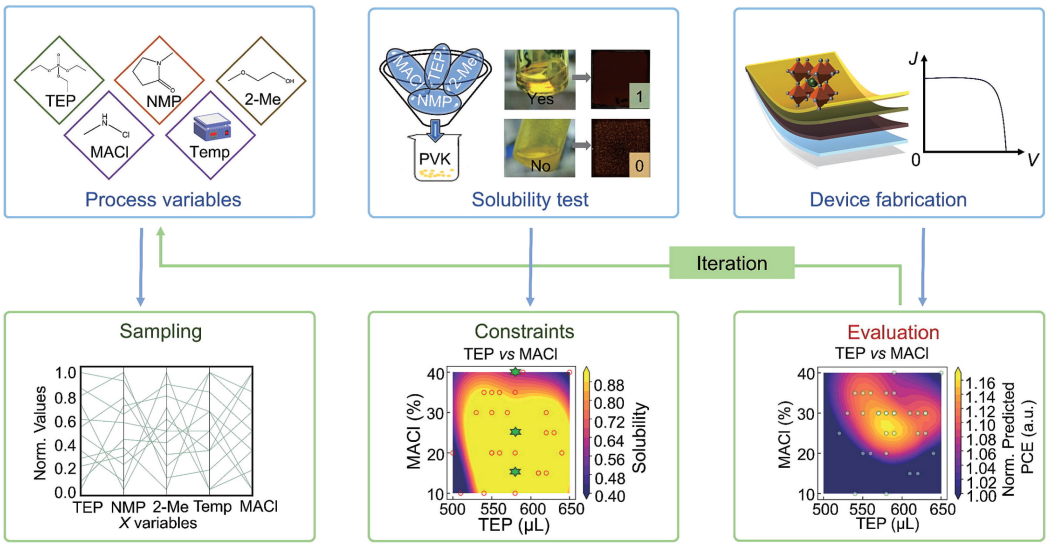


图 5 钙钛矿太阳能电池在贝叶斯优化框架下的设计示意图[17]

Fig. 5 Schematic diagram of perovskite solar cell design in the Bayesian optimization framework[17]

一些药物成分或其中间体作为对人体无害的物质，也为开发绿色溶剂提供了思路。四乙基正碳酸酯(TEOC)是一种对人体健康和环境危害较小的溶剂，具有 161 ℃的高沸点和适中的介电常数，主要作为合成药物的中间体，是康地沙坦环列西汀临床应用中治疗循环系统疾病的关键中间体。Wang 等[86]的研究提出将 TEOC 作为新型反溶剂，用于制备 $MAPbI_3$ 倒置平面钙钛矿太阳能电池。与 CB 相比，TEOC 处理的器件实现了更高的效率。

5 结 语

钙钛矿光伏材料在近 10 年里迅速发展，为光伏产业贡献巨大，但由于对环境和生产者的安全和健康所带来的挑战，让其绿色溶剂开发得到重视。本文对钙钛矿绿色溶剂的研究进展作了清楚的梳理，首先按功能不同分类介绍 4 类绿色溶剂，然后简要介绍绿色溶剂在替代 N，N-二甲基甲酰胺、氯苯等传统有毒溶剂时所采取的表面张力调控、共溶剂设计、配位工程等策略，最后总结绿色溶剂具体应用策略和现存问题，为钙钛矿光伏的绿色制造提供溶剂开发方面的思路。

由于绿色溶剂技术针对大面积涂布中去湿润、加工窗口狭窄、边缘效应等多方面工艺瓶颈已有了初步的解决思路，并结合了机器学习辅助溶剂筛选及生命周期评估，因此该技术成熟度正在稳步提高。在环保法规日趋严格、绿色能源蓬勃发展的现状下，绿色溶剂技术将推

动钙钛矿太阳能电池从实验室顺利走向产业化，在降低职业健康风险、减少低挥发性有机化合物排放及提升生命周期环境效益之间取得平衡，真正做到高性能、低成本、可持续三者兼顾，实现钙钛矿太阳能电池的绿色化生产。

参考文献　References

[1] KOJIMA A, TESHIMA K, SHIRAI Y, *et al*. Journal of the American Chemical Society[J], 2009, 131(17): 6050-6051.

[2] National Renewable Energy Laboratory. Best Research-Cell Efficiencies [R/OL], (2026-01-08)[2026-05-16]. https://www.nlr.gov/pv/cell-efficiency.

[3] WU L, HU S, YANG F, *et al*. Nature Reviews Materials[J], 2025, 10(7): 536-549.

[4] MA X, YAO X, ZHAO Y, *et al*. Journal of Environmental Management[J], 2025, 393: 127170.

[5] DUAN C, GAO H, XIAO K, *et al*. Nature Energy[J], 2024, 10(3): 318-328.

[6] WANG Y, LIU Y, LUO X, *et al*. Science[J], 2025, 390(6777): 1021-1028.

[7] 中华人民共和国生态环境部, 中华人民共和国工业和信息化部, 中华人民共和国农业农村部. 重点管控新污染物清单(2023 年版): 部令第 28 号[S]. 北京: 中华人民共和国生态环境部, 2022.
Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China, Ministry of Industry and Information Technology of the People's Republic of China, Ministry of Agriculture and Rural Affairs of the People's Republic of China. List of Priority Control New Pollutants (2023 edition): Decree No. 28[S]. Beijing: Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China, 2022.

[8] 中华人民共和国生态环境部. 大气污染物综合排放标准: GB 16297-1996[S]. 北京: 中华人民共和国生态环境部, 1996.
Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China. Integrated Emission Standard of Air Pollutants: GB 16297-1996 [S]. Beijing: Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China, 1996.

[9] PRAT D, HAYLER J, WELLS A. Green Chemistry[J], 2014, 16(10): 4546-4551.

[10] PRAT D, WELLS A, HAYLER J, *et al*. Green Chemistry[J], 2016, 18(1): 288-296.

[11] ZHAO J, CAI B, LUO Z, *et al*. Scientific Reports[J], 2016, 6(1): 21976.

[12] XIAO S, ZHANG K, ZHENG S, *et al*. Nanoscale Horizons[J], 2020, 5(8): 1147-1154.

[13] ZHUMEKENOV A A, BURLAKOV V M, SAIDAMINOV M I, *et al*. ACS Energy Letters[J], 2017, 2(8): 1782-1788.

[14] ZHANG Y, REN L, ZHAI P, *et al*. Energy & Environmental Science [J], 2024, 17(1): 296-306.

[15] ZHAI P, REN L, ZHANG Y, *et al*. Energy & Environmental Science [J], 2023, 16(7): 3014-3024.

[16] REZAEE E, KUTSAROV D I, ZHANG J, *et al*. Small Methods[J], 2024, 8(2): 2300564.

[17] MA L, LIU C, PU Y, *et al*. Journal of Energy Chemistry[J], 2025, 111: 737-743.

[18] SHI Y, LIU Z, FENG T, *et al*. Materials Research Bulletin[J], 2026, 194: 113760.

[19] XU T, LI Y, CAI H, *et al*. Solar Energy[J], 2024, 272: 112461.

[20] DUTTA S, YU I K M, TSANG D C W, *et al*. Chemical Engineering Journal[J], 2019, 372: 992-1006.

[21] JIANG Z, ZENG Y, HU D, *et al*. Green Chemistry[J], 2023, 25(3): 871-892.

[22] TEOH K S, MELCHIORRE M, KRETH F A, *et al*. ChemSusChem [J], 2023, 16(1): e202201845.

[23] SONG Y X, ZHONG Z Y, CHEN M J, *et al*. Journal of Central South University[J], 2024, 31(12): 4536-4548.

[24] ZHANG Z. ChemSusChem[J], 2016, 9(2): 156-171.

[25] MIAO Y, REN M, CHEN Y, *et al*. Nature Sustainability[J], 2023, 6(11): 1465-1473.

[26] KIM B J, CHOI H, PARK S, *et al*. ACS Sustainable Chemistry & Engineering[J], 2024, 12(35): 13371-13381.

[27] HUANG S H, TIAN K Y, HUANG H C, *et al*. ACS Applied Materials & Interfaces[J], 2020, 12(23): 26041-26049.

[28] CAO X, ZHANG G, CAI Y, *et al*. Solar RRL[J], 2020, 4(4): 2000008.

[29] SIRIPRAPARAT A, MITTANONSAKUL P, PANSA-NGAT P, *et al*. Scientific Reports[J], 2023, 13(1): 9335.

[30] MAJEED S M, MOHAMMED M K A, AHMED D S. Journal of Materials Chemistry C[J], 2022, 10(43): 16480-16491.

[31] GUERRERO-LEÓN L A, BAUTISTA-QUIJANO J R, HEFFNER H, *et al*. Advanced Energy Materials[J], 2024, 14(45): 2402916.

[32] ZHANG W, LI Y, LIU X, *et al*. Chemical Engineering Journal[J], 2020, 379: 122298.

[33] LEE D S, LEE H J, SONG Y, *et al*. Chemical Communications[J], 2025, 61(10): 2011-2025.

[34] MOHAMMED M K A, SINGH S, AL-MOUSOI A K, *et al*. RSC Advances[J], 2022, 12(50): 32611-32618.

[35] CHENG Y, WEI Q, YE Z, *et al*. Solar RRL[J], 2022, 6(9): 2200418.

[36] RAEISI S, MOHAMMADI M, HOSEINI A, *et al*. Journal of Electronic Materials[J], 2023, 52(2): 1419-1425.

[37] YANG Z, WEI J, ZHENG J, *et al*. ACS Applied Materials & Interfaces[J], 2024, 16(15): 19838-19848.

[38] LIU Z, YANG P, KANG T, *et al*. Chinese Journal of Luminescence [J], 2025, 46(1): 70-80.

[39] KIM S, OH H, KANG G, *et al*. ACS Applied Energy Materials[J], 2020, 3(7): 6995-7003.

[40] XU W, GAO Y, MING W, *et al*. Advanced Materials[J], 2020, 32(38): 2003965.

[41] ZHOU Z, HUANG C, XIANG Z, *et al*. Journal of Physics and Chemistry of Solids[J], 2026, 213: 113615.
[42] MANN D S, THAKUR S, SANGALE S S, *et al*. Solar Energy Materials and Solar Cells[J], 2024, 269: 112768.
[43] LI H, HAN J, LAN Q, *et al*. Applied Physics Letters[J], 2024, 125(18): 183902.
[44] SUN Q, LIU G, DUAN S, *et al*. Nano Letters[J], 2025, 25(10): 3883-3890.
[45] LIU S, GUAN Y, SHENG Y, *et al*. Advanced Energy Materials[J], 2020, 10(13): 1902492.
[46] CHAO L, XIA Y, DUAN X, *et al*. Joule[J], 2022, 6(9): 2203-2217.
[47] YUN H S, KWON H W, PAIK M J, *et al*. Nature Energy[J], 2022, 7(9): 828-834.
[48] JEONG S, PARK S H, YUN S, *et al*. Advanced Science[J], 2025, 12(8): 2412959.
[49] WANG X, LI H, LU S, *et al*. Journal of Physical Chemistry Letters[J], 2025, 16(27): 6996-7003.
[50] POLI I, PETROZZA A. ACS Energy Letters[J], 2024, 9(9): 4596-4597.
[51] LI M, CHEN C. Journal of Physical Chemistry Letters[J], 2025, 16(3): 754-765.
[52] LI W, LIU L, DONG X, *et al*. Nano Energy[J], 2025, 138: 29.
[53] CURZONS A D, CONSTABLE D C, CUNNINGHAM V L. Clean Products and Processes[J], 1999, 1(2): 82-90.
[54] HENDERSON R K, JIMÉNEZ-GONZÁLEZ C, CONSTABLE D J C, *et al*. Green Chemistry[J], 2011, 13(4): 854-862.
[55] ALFONSI K, COLBERG J, DUNN P J, *et al*. Green Chemistry[J], 2008, 10(1): 31-36.
[56] PRAT D, PARDIGON O, FLEMMING H W, *et al*. Organic Process Research & Development[J], 2013, 17(12): 1517-1525.
[57] BABAEI A, ALBERO-BLANQUER L, IGUAL-MUÑOZ A M, *et al*. Polyhedron[J], 2018, 147: 9-14.
[58] LEI L, LI M, GRANT D M, *et al*. Chemistry of Materials[J], 2020, 32(14): 5958-5972.
[59] MENG F N, CHENG L, WANG F, *et al*. Advanced Sustainable Systems[J], 2025, 9(2): 202400695.
[60] KÜFFNER J, HANISCH J, WAHL T, *et al*. ACS Applied Energy Materials[J], 2021, 4(10): 11700-11710.
[61] JOHANNES K, TINA W, MORITZ S, *et al*. ACS Applied Materials & Interfaces[J], 2020, 12(47): 52678-52690.
[62] BRINKMANN K O, HE J, SCHUBERT F, *et al*. ACS Applied Materials & Interfaces[J], 2019, 11(43): 40172-40179.
[63] ZHENG X, KONG W, WEN J, *et al*. Nature Communications[J], 2024, 15: 4907.
[64] SIEGRIST S, YANG S C, GILSHTEIN E, *et al*. Journal of Materials Chemistry A[J], 2021, 9(47): 26680-26687.
[65] PARK S J, ENG J L, PETHE S D, *et al*. ChemSusChem[J], 2025, 18(10): 202402499.
[66] DENG Y, VAN B C H, DAI X, *et al*. Science Advances[J], 2019, 5(12): eaax7537.
[67] CAMACHO-CÁCERES J, MILLÁN-FRANCO M A, MEJÍA-VÁZQUEZ M C, *et al*. Journal of Materials Science: Materials in Electronics[J], 2023, 34(36): 2263.
[68] SANGALE S S, MANN D S, LEE H J, *et al*. Communications Materials[J], 2024, 5(1): 201.
[69] ZHANG H, DARABI K, NIA N Y, *et al*. Nature Communications[J], 2022, 13: 27740.
[70] WANG R, ZHU J, YOU J, *et al*. Energy & Environmental Science[J], 2024, 17(7): 2662-2669.
[71] DONG Y, ZENG P, YU Y, *et al*. Advanced Electronic Materials[J], 2020, 6(3): 201901162.
[72] CARTLEDGE C, PENUKULA S, GIURI A, *et al*. Energies[J], 2024, 17(6): 1455.
[73] YU H, CAO B. New Journal of Chemistry[J], 2024, 48(30): 13342-13349.
[74] LI L, HUANG Z, MENG X, *et al*. Advanced Materials[J], 2024, 36(15): 202310752.
[75] SHI G, HUANG Z, QIAO R, *et al*. Nature Communications[J], 2024, 15: 45488.
[76] GONG C, WANG C, FAN B, *et al*. Advanced Materials[J], 2026, 38(11): 202518582.
[77] XIAO X, XU N, TIAN X, *et al*. Nature[J], 2025, 638(8051): 670-675.
[78] WANG L, WANG X, DENG L L, *et al*. Materials Horizons[J], 2020, 7(3): 934-942.
[79] HYUN P S, SU J I, WOONG J J. Chemical Engineering Journal[J], 2021, 425: 131475.
[80] TAYLOR A D, SUN Q, GOETZ K P, *et al*. Nature Communications[J], 2021, 12: 1878.
[81] HU M, ZHAO Y, LI D, *et al*. Materials Science in Semiconductor Processing[J], 2025, 189: 109314.
[82] MIRLETZ H, HIESLMAIR H, OVAITT S, *et al*. Nature Physics[J], 2023, 19(10): 1376-1378.
[83] LI B, GAO D, ZHANG C, *et al*. Nature Reviews Materials[J], 2025, 11(1): 10-25.
[84] CARDENAS L E R, OUARET R, SCHWERSENZ L, *et al*. Screening of Solvents for Perovskite Solar Cells Using Reverse Engineering Approach[C]//MANENTI F, REKLAITIS G V. Computer Aided Chemical Engineering. Amsterdam: Elsevier, 2024: 2305-2310.
[85] SHANG Y, MENG W, LU F, *et al*. Advanced Materials[J], 2025, 37(29): 202504602.
[86] WANG M, FU Q, YAN L, *et al*. Chemical Engineering Journal[J], 2020, 387: 123966.